

Melting of crystalline films with quenched random disorder

Diploma thesis

Peter Stahl*

*Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, Zùlpicher Str. 77,
D-50937 Köln, Germany*

Abstract

According to the Kosterlitz-Thouless-Theory two-dimensional solid films melt by the unbinding of dislocation pairs. A model including quenched random impurities was already studied by Nelson [Phys. Rev. B 27 (1983) 2902] , who predicted a reentrance into the disordered phase at low temperatures and weak disorder. New investigations of the physically related XY-model [e.g. T. Nattermann et al., J. Phys. (France) 5 (1995), 565] and a work of Cha and Fertig [Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 4867] refuse this reentrant melting. In this work we map the system onto a two-dimensional vector Coulomb gas and via a renormalization we derive flow equations both for the square and for the triangular lattice. An analysis of these flow equations shows a new behaviour in the low- temperature range, where the reentrance into the non-crystalline phase with short-range order is not found, but the crystalline phase with quasi-long-range order is preserved below a critical disorder strength of $\bar{\sigma}_c = \frac{1}{16\pi}$. Finally we estimate the influence of commensurate substrates and obtain phase diagrams, which show that the melting by dislocation unbinding can only be expected, if the lattice constant of the crystalline film is a multiple of the lattice constant of the substrate potential.

*now:

*Institute of Process Engineering, Swiss Federal Institute of Technology
(ETH Zürich), CH-8092 Zürich, Switzerland*

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang	2
1.2	Der Einfluß von Unordnung	8
2	Das Modell	11
2.1	Herleitung des Modells	11
2.1.1	Kristalliner Film ohne Unordnung	11
2.1.2	Beschreibung der Unordnung	14
2.2	Abbildung auf ein Coulombgas	15
2.2.1	Abbildung des Systems ohne Unordnung	16
2.2.2	Abbildung des Unordnungsanteils	18
2.3	Bisherige Resultate	20
2.3.1	Wiedereintritt in die ungeordnete Phase	20
2.3.2	Scheitern der Näherung für kleine Fugazitäten	22
2.4	Abschätzung der Phasengrenze	24
3	Dielektrischer Formalismus	29
3.1	Multipolentwicklung	29
3.2	Dipol-Wahrscheinlichkeit	34
3.2.1	Wahrscheinlichkeit bei $T = 0$	36
3.2.2	Wahrscheinlichkeit bei $T < T^*$	36
3.2.3	Wahrscheinlichkeit bei $T \geq T^*$	37
3.3	Polarisierbarkeit	38
3.3.1	Polarisierbarkeit ohne Unordnung	39
3.3.2	Polarisierbarkeit mit Unordnung	41

4	Flußgleichungen und Phasendiagramme	45
4.1	Ergebnisse für das Quadratgitter	45
4.1.1	Herleitung der Flußgleichungen	45
4.1.2	Fluß und Phasendiagramm	47
4.2	Ergebnisse für das Dreiecksgitter	49
4.2.1	Modifikationen für das Dreiecksgitter	49
4.2.2	Flußgleichungen für das Dreiecksgitter	52
4.2.3	Phasendiagramm für das Dreiecksgitter	52
4.3	Entropiefluß	54
5	Einfluß eines Substrats	57
5.1	Kommensurables Substrat	57
5.2	Phasendiagramm bei unterliegendem Substrat	63
6	Zusammenfassung	69
A	Coulombgas-Beschreibung	71
A.1	Abbildung auf ein Coulombgas	71
A.2	Vergleich mit der Elektrodynamik	73
B	Unordnungswechselwirkung	77
B.1	Varianz bei einer einzelnen freien Versetzung	77
B.2	Varianz bei einem Versetzungsdipol	78
C	Berechnungen zur Polarisierbarkeit	81
C.1	Polarisierbarkeit in der Elektrodynamik	81
C.2	Winkelintegration des Dipoltensors	82
D	Mittelung des Ordnungsparameters	85
D.1	Berechnung ohne Unordnung	85
D.2	Berechnung mit Unordnung	87
	Literaturverzeichnis	89

Kapitel 1

Einleitung

In der Festkörperphysik versteht man unter einem dreidimensionalen Kristall eine (fast) unendliche Wiederholung identischer Struktureinheiten, die Translationssymmetrie aufweist. Der Anteil der Struktureinheiten, die die Oberfläche bilden soll verschwindend gering sein. In drei Dimensionen bilden alle Stoffe - sieht man von Helium und Quasikristallen wie $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ ab - solche kristallinen Strukturen, die aber von eingefrorener Unordnung gestört werden können.

Daher gehören auch dreidimensionale Kristallstrukturen wie Metalle zum alltäglichen Erfahrungsbereich und das Schmelzen der Kristalle zu Flüssigkeiten bei Temperaturerhöhung kann unter geeignetem Druck beobachtet werden. Hierbei handelt es sich um einen Phasenübergang erster Ordnung, bei dem ein Sprung in der Entropie auftritt. Ausgelöst wird er durch die energetische Anregung des Gitters.

Obwohl sie auf Oberflächen häufig auftreten sind zweidimensionale kristalline Filme hingegen nicht so leicht zu beobachten, dennoch kann man das Schmelzen auch hier an einigen Systemen untersuchen. Dies sind unter anderen:

- Elektronen, die in einer einzigen Schicht etwa 100 \AA über der Oberfläche flüssigen Heliums aufgebracht werden. Dies geschieht mittels eines elektrischen Felds, welches senkrecht zur Oberfläche steht [1]. Bei genügend geringer Dichte verhalten sie sich klassisch.
- Polystyrolkugeln mit einem Durchmesser von etwa $0,3 \mu\text{m}$ bilden in Lösungen mit geeignetem pH-Wert Kolloide. Bringt man diese zwischen zwei Glasplatten mit einem Abstand von etwa $1 \mu\text{m}$, formen diese Kugeln ein zweidimensionales Dreiecksgitter, nehmen also Kristallstruktur an [8].

Die Phasenübergangs-Temperatur ist dabei systemabhängig. Sie wird von der Gitterkonstanten und den Lamé-Koeffizienten bestimmt. Dies führt dazu, daß die erwähnte Elektronenschicht eine Schmelztemperatur von etwa 1 K hat, während die Schmelztemperatur der Kolloide in der Größenordnung von 10^2 K liegt.

Im Gegensatz zum dreidimensionalen Fall, gibt es bei freien zweidimensionalen Kristallstrukturen für $T > 0$ aufgrund von Fluktuationen in den Moden der

niederenergetischen phononischen Anregungen keine echte langreichweitige Ordnung, somit also auch keine beliebig langreichweitige Translationssymmetrie. Hier existiert eine quasi-langreichweitige Ordnung, bei der die Korrelationsfunktion des Ordnungsparameters algebraisch abfällt. Auch das Schmelzen kann in zwei Dimensionen einen anderen Charakter haben. Neben dem Phasenübergang erster Ordnung existiert die Möglichkeit eines kontinuierlichen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs, bei dem sich Defektpaare auflösen und freie topologische Defekte entstehen, was zur Auflösung der Kristallstruktur führt. Die oben genannten zweidimensionalen Systeme zeigen diesen kontinuierlichen Schmelzprozeß. Exakte Messungen sind hierbei nicht einfach, dennoch bestätigen die Ergebnisse diese im folgenden näher erläuterte Theorie.

Dreidimensionale Kristalle sind gegenüber topologischen Defekten wesentlicher stabiler als zweidimensionale, daher tritt in drei Dimensionen kein durch topologische Defekte induziertes Schmelzen auf [8].

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Nach einer einleitenden Vorstellung des Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs mit dem Hinweis auf verwandte Systeme, wird ein Modell für zweidimensionale kristalline Filme mit Unordnung motiviert und in eine Coulombgas-Darstellung überführt. Die mit diesem Modell von Nelson [2] gewonnenen Ergebnisse werden diskutiert. Es folgt anschließend eine Neuuntersuchung des Modells mittels eines dielektrischen Formalismus und mit Hilfe der Renormierungsgruppe. Nach Präsentation der Ergebnisse, die sowohl für das Quadrat-, als auch für das Dreiecksgitter keinen Wiedereintritt in die nicht-kristalline Phase bei tiefen Temperaturen zeigen, wird abschließend der Einfluß eines Substrats untersucht.

1.1 Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang

Es ist seit längerem bekannt, daß topologische Defekte in zwei Dimensionen interessante Phasenübergänge verursachen können. Einen theoretischen Ansatz zur Untersuchung dieser Art von Phasenübergängen lieferten Kosterlitz und Thouless zu Beginn der 70er Jahre [9, 10]. Verschiedene zweidimensionale Systeme mit topologischer Unordnung, besitzen einen Phasenübergang, der mittels der Kosterlitz-Thouless-Theorie erklärt werden kann:

- Das sogenannte XY-Modell ist ein zweidimensionales Spinsystem, dessen klassische Spins $\mathbf{S}(\mathbf{x}) = S(\cos\theta(\mathbf{x}), \sin\theta(\mathbf{x}))$ (sie stellen hier auch den Ordnungsparameter dar) topologische Defekte in Form von Vortices ausbilden können. Die Spinphase $\theta(\mathbf{x})$, die die Richtung des Ordnungsparameters beschreibt, ändert sich bei Umlauf um einen Vortexkern um $2k\pi$, wobei k die Windungszahl des Vortex genannt wird. Somit ist ein Vortex ein Spinwirbel. Experimentell kann ein solches zweidimensionales Spinsystem auch durch dreidimensionale Systeme mit schwach gekoppelten Schichten realisiert werden. Der Phasenübergang entspricht hier den Übergang von der ferromagnetischen zur paramagnetischen Phase.
- Ferner ist eine Anwendung der Theorie auf suprafluide Heliumfilme möglich, da auch hier Vortices gebildet werden können. Der Ordnungsparameter

1.1. DER KOSTERLITZ-THOULESS-PHASENÜBERGANG

wird allerdings nicht durch einen zweidimensionalen Vektor, sondern eine äquivalente komplexe Zahl dargestellt. Das suprafluide Helium geht mittels des Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs in den normal flüssigen Zustand über.

- Schließlich führen topologische Defekte auch in den im folgenden behandelten zweidimensionalen kristallinen Filmen zu einem Phasenübergang von der kristallinen in die nicht-kristalline Phase. Hier liegen allerdings keine Vortices, sondern Versetzungen vor, die sich nicht alleine durch eine skalare Windungszahl beschreiben lassen, da sie auch eine Richtung haben.

Anschaulich entspricht eine Versetzung im Quadratgitter dem Endpunkt einer zusätzlich eingefügten Reihe von Gitterbausteinen. Dies ist in Abbildung 1.1a dargestellt. Der Burgers-Vektor, der entsprechend der Abbildung konstruiert wird, gibt Richtung und Stärke der Versetzung an; sind zwei Reihen eingefügt ist der Burgers-Vektor doppelt so groß, wie bei einer eingefügten Reihe. Wie in Abbildung 1.1b gezeigt, besteht eine Versetzung auf dem Dreiecksgitter in der Kernregion aus einem Platz mit fünf und einem Platz mit sieben Nachbarn. Die Versetzungen befinden sich auf den Gitterpunkten des dualen Gitters, welches beim Quadratgitter ebenfalls ein Quadratgitter, beim Dreiecksgitter ein hexagonales Gitter ist. Es handelt sich ausschließlich um sogenannte “Stufen-Versetzungen”, da “Schrauben-Versetzungen” nur oberhalb von zwei Dimensionen auftreten können.

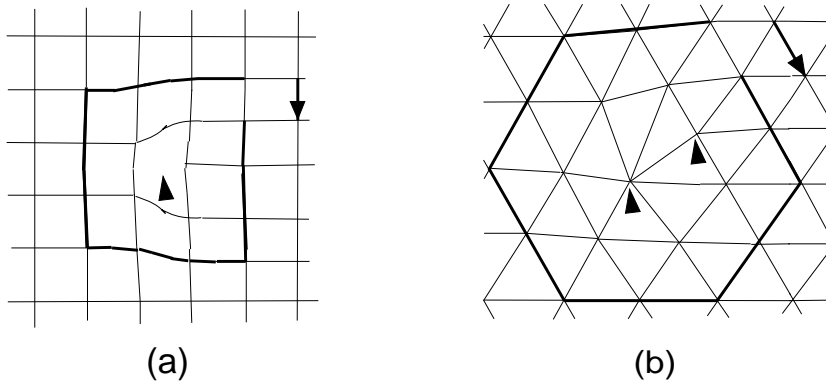


Abbildung 1.1: Elementare Versetzungen (a) im Quadrat- und (b) im Dreiecksgitter. Die durch dickere Linien eingezeichneten Wege sind wegen der Versetzungen nicht geschlossen. Die Burgers-Vektoren sind durch Pfeile dargestellt. Die Dreiecke markieren die Plätze, die unregelmäßige Bonds aufweisen [11].

Die Energie einer einzelnen Versetzung mit Burgers-Vektor \mathbf{b} divergiert logarithmisch mit der Systemgröße R , es gilt $E \propto \mathbf{b}^2 \ln R$. Daher ist es bei tiefen Temperaturen die Wahrscheinlichkeit, ein großes System mit einer einzelnen Versetzung vorzufinden, verschwindend gering. Betrachtet man den Burgers-Vektor als Vektorladung, so muß das System verschwindende Gesamtladung $\sum \mathbf{b}_i = 0$ aufweisen. Nur dann bleibt die Gesamtenergie auch für beliebige große Systeme endlich, da sich die

1.1. DER KOSTERLITZ-THOULESS-PHASENÜBERGANG

obigen divergenten Beiträge in diesem Fall mit Beiträgen aus der Wechselwirkung der Versetzungen wegheben. Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang unterscheidet allgemein zwischen einer Tieftemperatur- und einer Hochtemperaturphase. In der **Tieftemperaturphase** sind gepaarte Versetzungen (Versetzungsdipole) neben den Phononen die elementaren Anregungen des Systems. Einen solchen Dipol für das Quadratgitter zeigt Abbildung 1.2.

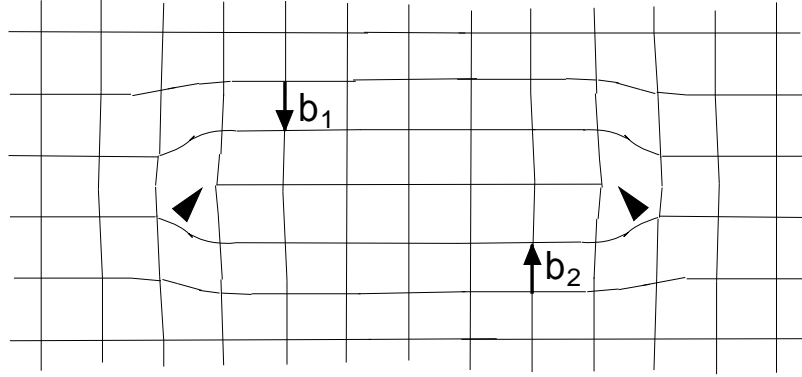


Abbildung 1.2: Versetzungsdipol auf dem Quadratgitter mit $\mathbf{b}_1 = -\mathbf{b}_2 = -\mathbf{e}_y$

Wie Mermin 1968 gezeigt hat [12], wird in zweidimensionalen Kristallen die langreichweitige Ordnung bei $T > 0$ durch Fluktuationen zerstört, die durch langwellige Phononen hervorgerufen werden. Es herrscht hier quasi-langreichweitige Ordnung vor, was heißt, daß die Translations-Korrelationsfunktion des Translationsordnungsparameters $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ zwischen den Plätzen algebraisch abfällt [11]. Der Translationsordnungsparameter ist wie folgt definiert:

$$\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})}, \quad (1.1)$$

hierbei ist \mathbf{G} ein Vektor des reziproken Gitters und $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ ein Vektorfeld, daß die Verschiebung der Kristallbausteine von ihrem Gleichgewichtsplatz mißt. Die algebraisch abfallende Korrelationsfunktion nimmt folgende Form an:

$$G(\mathbf{r}) = \langle \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})^* \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{0}) \rangle \propto r^{-\eta_G}. \quad (1.2)$$

$\langle \dots \rangle$ steht für eine thermische Mittelung. Der Exponent η_G ist abhängig von den Lamé-Koeffizienten λ, μ , die Konstanten des Gitters sind

$$\eta_G = \frac{|\mathbf{G}|^2 T (3\mu + \lambda)}{4\pi\mu(2\mu + \lambda)}. \quad (1.3)$$

Separiert man die phononischen Systemanregungen von den Anregungen durch Versetzungen und transformiert den Anteil letzterer auf ein Coulombgas (Details werden in Kapitel 2 erläutert), so erhält man für die Energie eines Dipols

$$E \propto J \left(\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \ln |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - \frac{(\mathbf{b}_1 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (\mathbf{b}_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \right), \quad (1.4)$$

1.1. DER KOSTERLITZ-THOULESS-PHASENÜBERGANG

J ist hierbei eine Kopplungskonstante, die von den Lamé-Koeffizienten des Gitters abhängt: $J = J(\lambda, \mu)$.

Der Betrag der Burgers-Vektoren geht quadratisch in die Energie ein, es kann also in guter Näherung angenommen werden, daß nur Dipole mit Vektorbeträgen $|\mathbf{b}| = a$ gebildet werden, da Dipole mit größeren Vektorbeträgen demnach wesentlich unwahrscheinlicher sind. Bei niedrigen Temperaturen ist nur eine geringe Anzahl an Versetzungsdipolen vorhanden, sie nimmt aber mit steigender Temperatur zu, wie auch die Dipolgröße wächst. Es kommt zu Abschirmungseffekten, denn für Dipole mit weit auseinander liegenden Burgers-Vektoren wird die Kopplung durch dazwischen liegende kleinere Dipole reduziert. Dennoch bleibt in der Tieftemperaturphase die Kopplung auch im Limes $r \rightarrow \infty$ endlich (r : Dipolgröße).

In der **Hochtemperaturphase** hingegen werden die Abschirmungseffekte so stark, daß man für $r \rightarrow \infty$ verschwindende Kopplung hat ($J \rightarrow 0$). Die Korrelationsfunktion fällt hier exponentiell ab [11]:

$$G(r) \propto e^{-\frac{r}{\xi}}. \quad (1.5)$$

ξ ist die Korrelationslänge. Oberhalb der Übergangstemperatur $T_m = J/16\pi$ lösen sich die Versetzungspaare auf, in der Hochtemperaturphase liegen damit freie Versetzungen vor.

Der wesentliche Vorgang beim Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang ist also das Dissoziieren der Versetzungsdipole. Es liegt keine kristalline Struktur mehr vor, da freie Versetzungen dazu führen, daß die Ordnung in der Hochtemperaturphase nicht mehr quasi-langreichweitig, sondern kurzreichweitig ist. Die Korrelationslänge ξ bei diesem Phasenübergang nimmt folgende Werte an:

$$\begin{aligned} \xi &\propto \exp \left[\left(\frac{b}{T-T_m} \right)^{\bar{\nu}} \right] & T &> T_m \\ \xi &= \infty & T &\leq T_m \end{aligned} \quad (1.6)$$

Hierbei ist b eine materialabhängige Konstante, der Exponent $\bar{\nu}$ nimmt auf dem Quadratgitter den Wert 0.5 und auf dem Dreiecksgitter den genäherten Wert 0.3696 an [13].

Wie Kosterlitz in [10] gezeigt hat, gilt für den singulären Anteil der freien Energie

$$F_{sing} \propto \xi^{-2}. \quad (1.7)$$

Mit (1.6) folgt daraus, daß sowohl die freie Energie als auch alle ihre Ableitungen bei $T \rightarrow T_m$ verschwindende singuläre Anteile haben und daher kontinuierlich sind. Somit ist der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang ein Übergang *unendlicher* Ordnung. Man kann die Phasenübergangstemperatur nur bestimmen, wenn man die Kopplung auf großen Längenskalen betrachtet, die bei T_m verschwindet.

Eine besondere Eigenschaft des Phasenübergangs bei kristallinen Filmen ist, daß in der Hochtemperaturphase zwar kurzreichweitige Ordnung bezüglich der

1.1. DER KOSTERLITZ-THOULESS-PHASENÜBERGANG

Translations-Korrelationsfunktion vorliegt, aber eine Orientierungs-Korrelationsfunktion mit einem Ordnungsparameter

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= e^{4/\theta(\mathbf{r})} && \text{für Quadratgitter} \\ \psi(\mathbf{r}) &= e^{6/\theta(\mathbf{r})} && \text{für Dreiecksgitter}\end{aligned}\quad (1.8)$$

hier noch quasi-langreichweitige Ordnung aufweisen kann. $\theta(\mathbf{r})$ mißt die Bond-Orientierung relativ zu einer festen Referenzachse und ist eine Funktion, die alleine vom Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ abhängt. Durch einen zweiten Kosterlitz-Thouless-Übergang bei $T_i > T_m$ erreicht man dann die isotrop flüssige Phase, in der sowohl bezüglich Translation als auch bezüglich Orientierung nur kurzreichweitige Ordnung vorliegt. Die Zwischenphase mit quasi-langreichweitiger Ordnung in der Orientierung, aber kurzreichweitige Ordnung bezüglich der Translation wird im Fall des Quadratgitters "tetratische", im Fall des Dreiecksgitters "hexatische" Flüssigkristall-Phase genannt [14]. Die hier auftretenden topologischen Defekte sind sogenannte Disklinationen: Auf einem geschlossenen Weg um eine Disklination in der hexatischen Phase ändert sich die Bond-Orientierung um ein Vielfaches von 60 Grad (in der tetratischen Phase 90 Grad). Unterhalb von T_i liegen nur Disklinationspaare vor, die bei T_i dissoziieren. Dabei entspricht ein Disklinationsdipol einer freien Versetzung, weswegen man auch Versetzungsdipole als eine Verbindung von vier Disklinationen betrachten kann. Abbildung 1.3 verdeutlicht die Phasenabfolge.

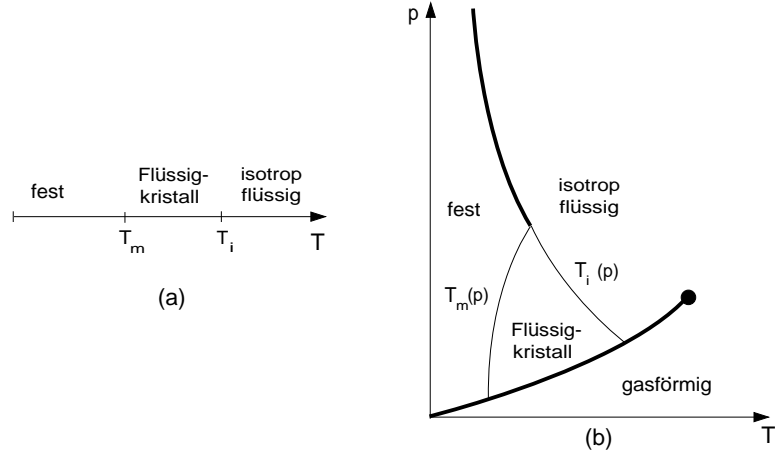


Abbildung 1.3: Phasendiagramm (a) des zweistufigen Übergangs von einem zweidimensionalen Kristall in eine isotrope Flüssigkeit, (b) zeigt ein spekulatives p - T -Phasendiagramm, in dem feste, flüssige, gasförmige und Flüssigkristall-Phase auftreten (nach [14]). In (b) sind dünne Linien Kosterlitz-Thouless-Übergänge, massive Linien Phasenübergänge erster Ordnung.

Der in Abbildung 1.3 eingezeichnete, rein spekulative Phasenübergang erster Ordnung zwischen fester und isotrop flüssiger Phase ist im Rahmen der Kosterlitz-Thouless-Theorie dann möglich, wenn die Auflösung der Disklinationspaare rechnerisch vor der Auflösung der Versetzungspaare erfolgen soll. Dann fallen beide Übergänge zusammen zu einem Phasenübergang erster Ordnung.

1.1. DER KOSTERLITZ-THOULESS-PHASENÜBERGANG

Die folgende Tabelle veranschaulicht noch einmal die Phasenabfolge und das Verhalten der wesentlichen Größen in den verschiedenen Phasen.

	kristallin	tetratisch/hexatisch	isotrop flüssig
Versetzungen	gepaart	frei	frei
Disklinationen	als Quartette	gepaart	frei
Translations-Korrelation	quasi-lang-reichweitig	kurzreichweitig	kurzreichweitig
Orientierungs-Korrelation	langreichweitig	quasi-lang-reichweitig	kurzreichweitig

Abbildung 1.4 zeigt beispielhaft das beschriebene Schmelzen von der festen über die hexatische in die isotrop flüssige Phase am Beispiel eines Dreiecksgitters.

A separate downloading of this figure is possible.

Abbildung 1.4: *Schmelzen eines Dreiecksgitters von der festen Phase (A) über die hexatische Phase (B, C) in die isotrop flüssige Phase (D). Schwarz eingefärbte Bereiche markieren Versetzungen und Disklinationen (aus [15]).*

In Abbildung 1.4(A) befindet sich das System noch im festen Zustand. Man findet hier vier Versetzungspaare und vier ungebundene Versetzungen, die aber nahe am Rand der Darstellung liegen, deren Partner sich also außerhalb des Darstellungsbereichs befinden. In (B) und (C) ist die Translations-Korrelation schon nicht mehr quasi-langreichweitig, während dieses Verhalten für die Orientierungs-Korrelation noch vorzufinden ist. Hier befindet sich das System in der hexatischen Phase, in der freie Versetzungen und gebundene Disklinationen vorliegen. In der isotrop flüssigen Phase (D) existiert keinerlei Ordnung mehr.

Im folgenden soll aber nur auf den ersten Phasenübergang, also auf das Schmelzen der festen Phase eingegangen werden.

Die Frage, wann die Kosterlitz-Thouless-Theorie anwendbar ist und wann ein Phasenübergang erster Ordnung auftritt, der nicht auf einem Defektschmelzen beruht, ist noch nicht völlig geklärt [16]. Allerdings ist anzunehmen, daß der im weiteren untersuchte Kosterlitz-Thouless-Übergang nur dann auftritt, wenn die hierfür notwendigen Bedingungen (beispielsweise eine kleine Versetzungskonzentration) erfüllt sind. Starke Anharmonizitäten wie eine starke Wechselwirkung mit einem Substrat können eine weitere Quelle für einen Schmelzübergang erster Ordnung sein.

Unter realen Bedingungen muß ein kristalliner Film immer auf ein Substrat aufgebracht werden. Gleichung (1.4) gilt in obiger Form nur für glatte Substrate. In Kapitel 5 wird versucht werden, den Substrateinfluß abzuschätzen.

1.2 Der Einfluß von Unordnung

Dem kristallinen Film kann zusätzlich Unordnung in Form von eingefrorenen, im System nicht beweglichen, Verunreinigungen hinzugefügt werden. Realisierbar ist dies mit Fremdpartikeln, die Kristallplätze besetzen und so Verzerrungen der Kristallstruktur hervorrufen. Da die Verteilung der Verunreinigungen in realen Systemen als zufällig angenommen werden kann, ist auch die lokale Konzentration der Verunreinigungen zufällig um einen Mittelwert verteilt. Mißt die Funktion $\delta c(\mathbf{r})$ die Abweichungen von diesem Mittelwert, so kann man annehmen, daß eine gegebene Konfiguration $\delta c(\mathbf{r})$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$\mathcal{P}[\delta c(\mathbf{r})] \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma} \int d^2r [\delta c(\mathbf{r})]^2\right) \quad (1.9)$$

auftritt [2]. Somit sind die lokalen Abweichungen $\delta c(\mathbf{r})$ unkorreliert und gaußverteilt mit der Varianz σ .

$$[\delta c(\mathbf{r})\delta c(\mathbf{r}')]_D = \sigma\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.10)$$

Hierbei bedeutet $[\dots]_D$ eine Mittelung über alle möglichen Unordnungsconfigurationen. Die Stärke der Unordnung ist gleichzusetzen mit der Stärke der Fluktuationen und wird durch die Varianz σ ausgedrückt, die einer eingefrorenen Temperatur entspricht.

Das Schmelzen von solchen kristallinen Filmen mit eingefrorener Unordnung wurde bereits 1983 von Nelson untersucht [2]. Abbildung 1.5 gibt das von ihm gefundene Phasendiagramm wieder. Auffällig ist, daß die quasi-langreichweitige Ordnung, die nur unterhalb einer kritischen Unordnungsstärke σ_c existiert, für niedrige Temperaturen $T < T_-(\sigma)$ wieder zerstört wird. Es findet demnach ein Wiedereintritt in die ungeordnete Flüssigkristall-Phase (hexatische, tetratische Phase) statt.

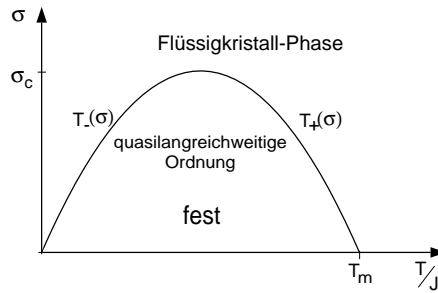


Abbildung 1.4: Phasendiagramm für kristalline Filme mit Unordnung nach Nelson 1983.

Ein analoges Phasendiagramm haben Rubinstein, Shraiman und Nelson 1983 auch für das physikalisch verwandte XY-Modell mit Phasenfrustration gefunden [17]. Simulationen von Josephson-Gittern zeigten allerdings keinen Wiedereintritt in die ungeordnete Phase [18, 19]. Ozeki und Nishimori konnten schließlich zeigen,

daß ein solcher Wiedereintritt bei den vorliegenden Systemen unmöglich ist [20]

Neuere Arbeiten von Nattermann, Scheidl, Korshunov, Li und Tang [3, 4, 5, 6] finden dann auch einen anderen Verlauf der Phasengrenze für das XY-Modell mit Phasenfrustration. Sie argumentieren, daß der in [17] gefundene Wiedereintritt in die ungeordnete Phase nur ein Artefakt der Näherung für kleine Vortextugazitäten ist, die im Temperaturbereich $T < T^*$ falsch wird, da aufgrund des Unordnungspotentials hier hohe Vortextdichten auftreten können und somit die Wechselwirkung zwischen den Vortextdipolen wichtig wird. Eine Neubetrachtung liefert im Temperaturbereich $T < T^*$ eine der Temperaturachse parallele Phasengrenze bei σ_c , unterhalb der die quasi-langreichweitige Ordnung auch bei beliebig kleinen Temperaturen erhalten bleibt (vgl. Abbildung 1.6). Neuere Simulationen konnten dieses Ergebnis bestätigen [21].

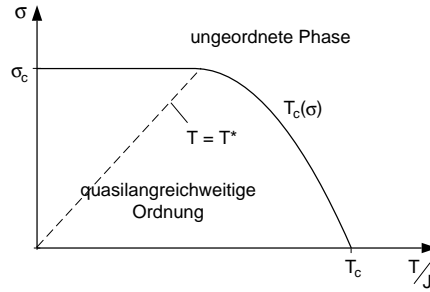


Abbildung 1.5: *Modifiziertes Phasendiagramm für das XY-Modell mit Phasenfrustration.*

Aufbauend auf den in [3, 4, 5, 6] entwickelten Methoden sollen in dieser Arbeit modifizierte Flußgleichungen und Phasendiagramme auch für kristalline Filme mit eingefrorener Unordnung gefunden werden.

1.2. DER EINFLUSS VON UNORDNUNG

Kapitel 2

Das Modell

2.1 Herleitung des Modells

In diesem Abschnitt wird ein Modell für zweidimensionale kristalline Filme mit eingefrorenen Verunreinigungen hergeleitet. Mit Hilfe der Elastizitätstheorie, die die Mechanik fester Körper beschreibt, erhält man eine Hamiltonfunktion für das System. Hierbei werden die Verunreinigungen als lokale Quellen von Verzerrungen behandelt. Solche Verunreinigungen können beispielsweise Unebenheiten des Substrats, oder aber Fremdelemente im Gitter des kristallinen Films sein. Es handelt sich also um positionelle oder kompositionelle Unordnung. Abbildung 2.1 zeigt ein einzelnes größeres Atom in einem Gitter gebildet aus kleineren Partikeln. Wie man unschwer erkennt, resultieren Dehnungen und Kompressionen des Gitters.

Eine solche Verunreinigung soll eingefroren sein, was heißt, daß sie zwar durch langwellige Phononen angeregt werden kann, aber dennoch nicht in der Lage ist, mit anderen Gitterbausteinen den Platz zu wechseln. Dies erfordert kleine Verunreinigungs-Diffusionskonstanten bei tiefen Temperaturen. Die Versetzungen hingegen sollen sich im thermischen Gleichgewicht befinden, welches sie mittels Gleiten durch den Kristall erreichen. Wir betrachten also Messungen nach Zeiten, die größer sind als die Relaxationszeiten der Versetzungen, die aber wesentlich kleiner sind als die Relaxationszeiten der Verunreinigungen, deren Freiheitsgrade eingefroren sind und deren Konfiguration während der Messung somit unverändert bleibt.

2.1.1 Kristalliner Film ohne Unordnung

Der zweidimensionale Kristall wird unter der Einwirkung innerer und äußerer Kräfte bis zu einem gewissen Grade deformiert. So erhöhen auch Versetzungen die elastische Energie des Kristalls. In der üblichen Kontinuumsnäherung [22, 23] wird die Deformation durch den Verschiebungsvektor \mathbf{u} dargestellt. Ist \mathbf{r} die Position eines Kristallpunktes ohne Deformation und \mathbf{r}' die Position mit

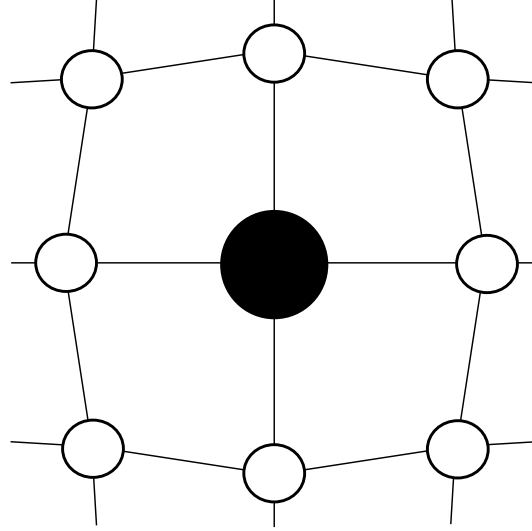


Abbildung 2.1: *Quadratgitter mit eingebrachter Verunreinigung, die zu Verzerrungen führt [2].*

Deformation, so gilt

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}. \quad (2.1)$$

$\mathbf{u}(\mathbf{r})$ ist damit das Verschiebungsfeld. Betrachtet man den Abstand zweier beliebiger, infinitesimal voneinander entfernten Punkte vor der Deformation dl und nach der Deformation dl' , dann hat man mit Summenkonvention

$$\begin{aligned} dl'^2 &= dx_i'^2 = (dx_i + du_i)^2 \\ &= dl^2 + 2u_{ik}dx_i dx_k \end{aligned} \quad (2.2)$$

dabei ist

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l(\mathbf{r})}{\partial x_i} \frac{\partial u_l(\mathbf{r})}{\partial x_k} \right). \quad (2.3)$$

Der Tensor u_{ik} ist der symmetrische *Verzerrungstensor*. Die auftretenden Deformationen sind stets klein in dem Sinne, daß die Änderung eines Abstandes im Kristall immer kleiner ist als der Abstand selbst. Daraus resultierend sind auch die Verschiebungen u_i und deren Ableitungen immer klein, so daß es genügt im Verzerrungstensor nur Ableitungen erster Ordnung zu berücksichtigen.

$$u_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right). \quad (2.4)$$

Da eine konstante Verschiebung keine Änderung der Energie im Kristall hervorruft und da der Verzerrungstensor klein ist, kann man die Hamiltonfunktion nach dem

Verzerrungstensor entwickeln. Asymmetrische Beiträge niedriger Ordnung kann die Hamiltonfunktion nicht enthalten, wenn sie rotationsinvariant bleiben soll. Ferner kann die Entwicklung keine in u_{ik} linearen Glieder enthalten, soll doch für $u_{ik} = 0$ ein Minimum vorliegen. Somit ist die allgemeinste Form, die die Hamiltonfunktion in niedrigster Ordnung annehmen kann:

$$H = \tilde{H} + \int d^2r K_{ijkl} u_{ij} u_{kl} \quad (2.5)$$

Betrachtet man nur den von der Deformation abhängigen *elastischen* Beitrag in H und berücksichtigt die in einem kontinuierlichen System vorliegenden Invarianzen, so bleibt

$$H_{el} = \frac{1}{2} \int d^2r (2\mu u_{ik}^2(\mathbf{r}) + \lambda u_{ii}^2(\mathbf{r})). \quad (2.6)$$

mit den beiden unabhängigen *Lamé-Koeffizienten* λ und μ . Wie Landau und Lifshitz [23] gezeigt haben, gilt diese Kontinuumsform des Hamiltonians exakt auch für das zweidimensionale Dreiecksgitter. Für das Quadratgitter findet man drei unabhängige Koeffizienten, die obige Form der Hamiltonfunktion kann aber als Näherung benutzt werden.

Da die inneren Kräfte einer Kristallfläche durch von außen, über den Flächenrand wirkende Kräfte kompensiert werden, muß für jede Komponente des Kraftvektors gelten

$$F_i = \int_{\Omega} d^2r f_i(\mathbf{r}) = \int_{\partial\Omega} dx_j \sigma_{ij}(\mathbf{r}). \quad (2.7)$$

Nach den Integrationsregeln ist hierbei f_i die Divergenz des symmetrischen *Spannungstensors* σ_{ij}

$$f_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \quad (2.8)$$

Betrachtet man nun eine kleine Änderung des Verschiebungsfelds $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ um den Wert $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$, so ist die hieraus resultierende Arbeit:

$$\delta W = \int d^2r f_i \delta u_i \quad (2.9)$$

Partielle Integration und Ausnutzung der Symmetrie des Tensors liefert

$$\delta W = -\frac{1}{2} \int d^2r \sigma_{ik}(\mathbf{r}) \delta \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right) \quad (2.10)$$

oder

$$\delta W = -\sigma_{ik}(\mathbf{r}) \delta u_{ik}(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Der Spannungstensor ist also gegeben durch

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial E_{el}}{\partial u_{ik}} \right)_S, \quad (2.12)$$

2.1. HERLEITUNG DES MODELLS

was ein weiteres Argument für die Nicht-Existenz von linearen Gliedern des Verzerrungstensors in der Hamiltonfunktion liefert, könnten diese doch bei $u_{ik} = 0$ zu einer Spannung $\sigma_{ik} \neq 0$ führen. Man erhält nun für die Hamiltonfunktion den folgenden Ausdruck [9]:

$$H_{el} = \frac{1}{2} \int d^2r \sigma_{ik}(\mathbf{r}) u_{ik}(\mathbf{r}), \quad (2.13)$$

mit (wegen (2.6))

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = 2\mu u_{ik}(\mathbf{r}) + \lambda \delta_{ik} u_{jj}(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Diese Hamiltonfunktion, die das System ohne den Einfluß von Unordnung beschreibt, wurde bereits in mehreren Arbeiten ausführlich diskutiert [13, 14, 24].

2.1.2 Beschreibung der Unordnung

Wie Abbildung 2.1 zeigt, sind die im Rahmen dieses Modells betrachteten Verunreinigungen fest lokalisierte Quellen von Dehnungen oder Kompressionen des Gitters, die sphärische Symmetrie bezüglich Verunreinigungspositionen \mathbf{r}_I aufweisen. Da das durch eine Verunreinigung erzeugte Verschiebungsfeld $\mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{r})$ ferner der Divergenzbedingung $\nabla \mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{r}) \propto \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I)$ genügen muß, hat es in Analogie zur Elektrodynamik in zwei Dimensionen die Form

$$\mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{r}) = \gamma \frac{\mathbf{r}}{r^2} = \gamma \nabla \ln |\mathbf{r}|. \quad (2.15)$$

Dabei mißt die Konstante γ die “Stärke” des Defekts. Eine solche Verunreinigung bewirkt eine Änderung Ω_0 der Kristallfilmfläche, die der Defektstärke proportional sein muß und einen positiven oder negativen Wert annehmen kann. Nach [25] ist

$$\Omega_0 = 2\pi\gamma \frac{2\mu + \lambda}{\mu + \lambda}. \quad (2.16)$$

Die hieraus resultierenden Körperkräfte lassen sich mit Hilfe von (2.8) und (2.14) berechnen.

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{r}) &= \mu \nabla^2 \mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{r}) + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \mathbf{u}^{\text{imp}}(\mathbf{r})) \\ &= \Omega_0 \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) (\mu + \lambda). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Die Wechselwirkungsenergie einer Verunreinigung mit einem externen Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ erhält man hieraus mittels (2.9). Demnach nimmt die Hamiltonfunktion für die Wechselwirkung zwischen der Unordnung und dem Verschiebungsfeld des Systems die folgende Form an [2, 26]

$$H_D = -\Omega_0(\mu + \lambda) \int d^2r c(\mathbf{r}) u_{kk}(\mathbf{r}), \quad (2.18)$$

wobei $c(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ über alle Verunreinigungspositionen summiert. Auf genügend großen Wellenlängen kann man die Diskretheit vernachlässigen und

$c(\mathbf{r})$ als glatte Funktion behandeln. Die lokale Konzentration der Verunreinigungen ist nun zufällig um einen Mittelwert $c_0 = [c(\mathbf{r})]_D$ verteilt. Es gilt

$$c(\mathbf{r}) = c_0 + \delta c(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Das Verhalten von $\delta c(\mathbf{r})$ ist bereits in (1.9) und (1.10) beschrieben worden. Der zu c_0 proportionale Term von H_D verhält sich wie ein hydrostatischer Druck, der durch eine Dehnung des Gitters kompensiert werden kann [2]. Somit ist nur der von $\delta c(\mathbf{r})$ abhängige Anteil des Hamiltonians von Interesse.

Die Gesamthamiltonfunktion des Systems mit Unordnung lautet demnach

$$\begin{aligned} H &= H_{el} + H_D \\ &= \frac{1}{2} \int d^2r [2\mu u_{ik}^2(\mathbf{r}) + \lambda u_{jj}^2(\mathbf{r})] - \Omega_0(\mu + \lambda) \int d^2r \delta c(\mathbf{r}) u_{jj}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Ziel des nächsten Abschnitts ist es, diese Hamiltonfunktion auf eine Coulombgas-Beschreibung abzubilden.

2.2 Abbildung auf ein Coulombgas

Das Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ kann in zwei Anteile zerlegt werden

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}^*(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

$\mathbf{v}(\mathbf{r})$ stellt den Verschiebungsanteil, der durch Phononen hervorgerufen wird dar. Dieser Anteil bildet keine topologischen Defekte aus. Für alle geschlossenen Wege γ im zweidimensionalen Film gilt

$$\oint_{\gamma} d\mathbf{v}(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.22)$$

Aus diesem Grund variiert der phononische Verzerrungstensor $v_{ik}(\mathbf{r})$ analytisch, ohne Singularitäten aufzuweisen.

Die Verschiebung aufgrund von Versetzungen $\mathbf{u}^*(\mathbf{r})$ hingegen erfüllt für geschlossene Wege γ , die eine Versetzung mit Burgers-Vektor \mathbf{b} einschließen, entsprechend Abbildung 1.1 die Bedingung

$$\oint_{\gamma} d\mathbf{u}^*(\mathbf{r}) = \mathbf{b}. \quad (2.23)$$

Ferner wählen wir $\mathbf{u}^*(\mathbf{r})$ so, daß ein System für welches $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}^*(\mathbf{r})$ gilt, sich bei gegebener Versetzungskonfiguration in einem lokalen Energieminimum befindet. Somit dürfen in einem solchen System keine inneren Kräfte vorliegen. Wegen (2.8) muß die Gleichgewichtsbedingung

$$\frac{\partial \sigma_{ik}^*}{\partial x_k} = 0, \quad (2.24)$$

2.2. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

überall, außer in den Versetzungskernen, erfüllt sein. Hierbei ist

$$\sigma_{ik}^*(\mathbf{r}) = 2\mu u_{ik}^*(\mathbf{r}) + \lambda \delta_{ik} u_{jj}^*(\mathbf{r}). \quad (2.25)$$

Setzt man diese Zerlegung in die Hamiltonfunktion ein, so erhält man einen phononischen und einen Versetzungsanteil, sowie einen Term der die Wechselwirkung zwischen Phononen und Versetzungen beschreibt

$$H_{el} = H_{phon} + H_{Ver} + H_{WW}, \quad (2.26)$$

wobei

$$\begin{aligned} H_{phon} &= \frac{1}{2} \int d^2r \left(2\mu v_{ik}^2(\mathbf{r}) + \lambda v_{ii}^2(\mathbf{r}) \right) \\ H_{Ver} &= \frac{1}{2} \int d^2r \left(2\mu u_{ik}^{*2}(\mathbf{r}) + \lambda u_{ii}^{*2}(\mathbf{r}) \right) \\ H_{WW} &= \frac{1}{2} \int d^2r \left(2\mu v_{ik}(\mathbf{r}) u_{ik}^*(\mathbf{r}) + \lambda v_{ii}(\mathbf{r}) u_{jj}^*(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Der Wechselwirkungsanteil nimmt nach explizitem Einsetzen des Tensors v_{ik} folgende Form an

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \int d^2r \left(2\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) u_{ik}^* + 2\lambda \frac{\partial v_i}{\partial x_i} u_{jj}^* \right). \quad (2.28)$$

Dieser Ausdruck kann partiell integriert werden, wobei keine Randterme auftreten, da wir annehmen, daß das Hinzufügen der Versetzungen die Form des Systemrandes nicht verändert. Daher

$$\begin{aligned} H_{WW} &= -\frac{1}{2} \int d^2r \left[2\mu \left(v_i \frac{\partial u_{ik}^*}{\partial x_k} + v_k \frac{\partial u_{ik}^*}{\partial x_i} \right) + \lambda \left(v_i \frac{\partial u_{jj}^*}{\partial x_i} + v_k \frac{\partial u_{jj}^*}{\partial x_k} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{2} \int d^2r \left(v_i \frac{\partial \sigma_{ik}^*}{\partial x_k} + v_k \frac{\partial \sigma_{ki}^*}{\partial x_i} \right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Aufgrund von (2.24) ergibt sich $H_{WW} = 0$, die Hamiltonfunktion zerfällt also in einen rein phononischen Anteil und einen Anteil, der nur die Wechselwirkung der Versetzungen untereinander beschreibt. Da wir im folgenden am Verhalten der Versetzungen interessiert sind, betrachten wir nur H_{Ver} .

2.2.1 Abbildung des Systems ohne Unordnung

Für ein System ohne Unordnung nimmt die zu untersuchende Hamiltonfunktion nach (2.13) folgende Form an

$$H = \frac{1}{2} \int d^2r \sigma_{ik}^*(\mathbf{r}) u_{ik}^*(\mathbf{r}). \quad (2.30)$$

Wegen (2.24) gelten die folgenden beiden Gleichungen überall, außer in den Versetzungskernen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{xx}^*}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}^*}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_{yx}^*}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}^*}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

Unter Berücksichtigung der *Symmetrie* von σ_{ik}^* , ist die folgende Darstellung von σ_{ik}^* die allgemeine Form der Lösung dieser beiden Gleichungen [23]:

$$\sigma_{ik}^*(\mathbf{r}) = \epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l\chi(\mathbf{r}) \quad (2.32)$$

Die Funktion χ nennt man *Verzerrungsfunktion* und hat im Potential Φ ihr elektrodynamisches Analogon. Aufgrund der Beziehung zwischen σ_{ik}^* und dem Verzerrungstensor u_{ik}^* findet man

$$u_{ik}^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\mu}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l\chi(\mathbf{r}) - \frac{\lambda}{4\mu(\lambda + \mu)}\nabla^2\chi(\mathbf{r})\delta_{ik}. \quad (2.33)$$

Führt man eine zweidimensionale vektorielle Versetzungsdichte $\mathbf{b}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \mathbf{b}_{\alpha}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})$ ein, welche über alle Versetzungspositionen \mathbf{r}_{α} summiert, so läßt sich (2.23) schreiben als

$$\oint_{\gamma} du_i^*(\mathbf{r}) = \oint_{\gamma} w_{ji}(\mathbf{r})dx_j = \int \epsilon_{kj}\nabla_k w_{ji}(\mathbf{r})d^2r = \sum_{\alpha} b_{\alpha i}. \quad (2.34)$$

Hierbei ist $w_{ji} = \nabla_j u_i^*$, und es wird nur über die Burgers-Vektoren \mathbf{b}_{α} summiert, die von dem Weg γ eingeschlossen werden. Drückt man diese Gleichung mittels der Versetzungsdichte aus, so resultiert

$$\epsilon_{kj}\nabla_k w_{ji}(\mathbf{r}) = b_i(\mathbf{r}). \quad (2.35)$$

Wendet man nun $\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l$ auf beide Seiten der Gleichung (2.33) an, so ergibt sich mit dem Kopplungskoeffizienten $J = 4\mu(\mu + \lambda)a^2/(2\mu + \lambda)$ [22, 27]

$$\begin{aligned} \frac{1}{J}\nabla^4\chi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l(w_{ik} + w_{ki}) \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l(w_{ik} - w_{ki}) + \epsilon_{ij}\epsilon_{kl}\nabla_j\nabla_l w_{ki} \\ &= \epsilon_{ji}\nabla_j b_i(\mathbf{r}) =: \eta(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Der erste Term der zweiten Zeile entfällt, da wir ein System ohne freie Disklinationen betrachten. Die oben definierte Funktion $\eta(\mathbf{r})$ nennt sich *Quellenfunktion* und beschreibt die Verteilung der Versetzungen. Sie entspricht der elektrodynamischen Ladungsdichte ρ . Der Vergleich mit der Elektrodynamik, wo $\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r})$ gilt, während hier $\nabla^4\chi(\mathbf{r}) = J\eta(\mathbf{r})$ ist, zeigt, daß hier doppelt so oft abgeleitet wird. Dies ist notwendig, um den Vektorcharakter der betrachteten Ladungen zu berücksichtigen.

Gelöst wird $\nabla^4\chi(\mathbf{r}) = J\eta(\mathbf{r})$ für $|\mathbf{r}| \gg a$ (die Gitterkonstante a wird im folgenden bis einschließlich Kapitel 4 immer gleich 1 gesetzt, gefordert ist also $|\mathbf{r}| \gg 1$), mit Hilfe der Green-Funktion

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi}r^2(\ln|\mathbf{r}| + C), \quad (2.37)$$

die

$$\nabla^4 g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi}\nabla^2(\ln|\mathbf{r}| + C + 1) = \delta(\mathbf{r}) \quad (2.38)$$

2.2. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

erfüllt. Denn setzt man für die Verzerrungsfunktion

$$\chi(\mathbf{r}) = J \int d^2 r' \eta(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.39)$$

an, so gilt (2.36).

(2.30) liefert mit (2.32) und (2.33) nach zweimaliger partieller Integration folgenden Ausdruck für die elastische Hamiltonfunktion [9]

$$H_{el} = \frac{1}{2} \int d^2 r \eta(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r}). \quad (2.40)$$

Die nicht berücksichtigten Randterme liefern Beiträge die proportional zu $\ln R$ sind, also mit der Systemgröße divergieren. Sie entfallen allerdings, wenn das System Ladungsneutralität aufweist. Um die Energie endlich zu halten, muß daher

$$\sum_{\alpha} \mathbf{b}_{\alpha} = 0. \quad (2.41)$$

erfüllt sein.

Eine etwas aufwendigere Rechnung unter Verwendung der Ergebnisse für χ und η (vgl. Anhang A.1) führt schließlich zu der gesuchten Coulombgas-Darstellung der Hamiltonfunktion für das Problem ohne Unordnung ($\mathbf{r}_{\alpha\beta} := \mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}$) [14, 27]

$$H_{el} = -\frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{b}_{\beta} \ln |\mathbf{r}_{\alpha\beta}| - \frac{(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha\beta})(\mathbf{b}_{\beta} \mathbf{r}_{\alpha\beta})}{r_{\alpha\beta}^2} \right) + E_C \sum_{\alpha} |\mathbf{b}_{\alpha}|^2 \quad (2.42)$$

Auffällig ist hierbei der von der üblichen Elektrodynamik abweichende zweite Term, der sich aus dem Vektorcharakter der hier betrachteten Ladungen ergibt. Die Energie ist nicht nur vom Abstand der Ladungen voneinander, sondern auch von deren Stellung zueinander abhängig. Dieser zweite Term nimmt beispielsweise für ein Paar aus antiparallelen Burgers-Vektoren gleichen Betrags die Form $-\frac{J}{4\pi} b^2 \cos^2 \theta$ an (vgl. Abbildung 2.2). Hier ist also bei gleichem Abstand ein Paar, bei dem die Burgers-Vektoren parallel zum Abstandsvektor stehen energetisch günstiger, als ein Paar, bei dem die Burgers-Vektoren senkrecht zum Abstandsvektor sind.

Allerdings ist der Wert dieses zweiten Terms unabhängig vom Betrag des Abstandes der Ladungen, er wird also bei sehr großen Abständen klein gegenüber dem ersten Term. Der dritte Term ist ein Ausdruck für die Energie der Versetzungskerne (vgl. Anhang A.1) und zeigt auch keine Abstandsabhängigkeit.

2.2.2 Abbildung des Unordnungsanteils

Die Hamiltonfunktion für die Wechselwirkung zwischen einer Verunreinigung und einem äußeren Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ beschreibt Gleichung (2.18). Für das externe Feld setzen wir im folgenden Formel (2.33) an. Physikalisch bedeutet

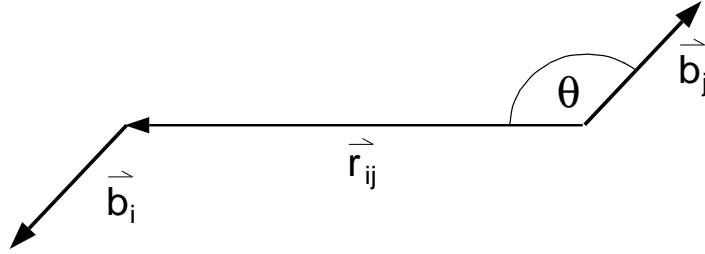


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung eines Paares aus Burgers-Vektoren

das, daß wir nur die Wechselwirkung zwischen der Unordnung und den Versetzungen berücksichtigen, die direkte Unordnung-Unordnung-Wechselwirkung aber vernachlässigen. Gerechtfertigt ist dies, da diese Wechselwirkung von der Ordnung $\delta c(\mathbf{r})\delta c(\mathbf{r}')$ ist und bei Unordnungsmittelung unter Benutzung von (1.10) wegfällt [2]. Es gilt also

$$H_D = - \left(\frac{1}{2\mu} - \frac{2\lambda}{4\mu(\lambda + \mu)} \right) (\mu + \lambda) \Omega_0 \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \nabla^2 \chi(\mathbf{r}). \quad (2.43)$$

Bei Verwendung der Definition der Verzerrungsfunktion χ folgt sofort

$$H_D = \frac{J}{2} \Omega_0 \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \sum_{\alpha} \epsilon_{zij} b_{\alpha i} \nabla_j \frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}|. \quad (2.44)$$

ϵ_{zij} ist hier der übliche Tensor dritter Stufe, wobei die z -Richtung, die Richtung senkrecht zum Kristall ist. Summiert man (2.44) mit der elastischen Hamiltonfunktion (2.42), ergibt sich abschließend die Hamiltonfunktion, die das vollständige Problem auf eine Coulombgas-Beschreibung abbildet [2]

$$H = - \frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{b}_{\beta} \ln |\mathbf{r}_{\alpha\beta}| - \frac{(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha\beta})(\mathbf{b}_{\beta} \mathbf{r}_{\alpha\beta})}{r_{\alpha\beta}^2} \right) + E_C \sum_{\alpha} |\mathbf{b}_{\alpha}|^2 + \frac{J}{4\pi} \Omega_0 \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{e}_z [\mathbf{b}_{\alpha} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})]}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})^2}. \quad (2.45)$$

Offenbar werden Versetzungen mit steigendem Betrag des Burgers-Vektors energetisch immer ungünstiger. Daher ist anzunehmen, daß bei tiefen Temperaturen lediglich solche Burgers-Vektoren auftreten, deren Betrag der Gitterkonstanten entspricht, für die also $|\mathbf{b}_{\alpha}| = 1$ gilt. Man sieht ferner, daß sich antiparallele Burgers-Vektoren anziehen, während parallele Burgers-Vektoren Energie gewinnen, wenn sie sich voneinander entfernen. Bei senkrecht zueinander stehenden Vektoren ist die Wechselwirkungsenergie unabhängig vom Betrag ihres Abstands, fällt doch der erste Term der Hamiltonfunktion in diesem Fall weg. Somit bilden sich bei genügend tiefen Temperaturen und nicht zu starker Unordnung Dipolpaare, freie

2.3. BISHERIGE RESULTATE

Versetzungen werden erst bei höheren Temperaturen oder starker Unordnung energetisch möglich sein.

Da bei tiefen Temperaturen und geringer Unordnung auch Ladungsneutralität ($\sum \mathbf{b}_\alpha = 0$) vorliegt, ist es möglich alle Versetzungen eindeutig zu Dipolen zu paaren. Dabei sind Dipole stets Versetzungspaare, deren Burgers-Vektoren antiparallel zueinander stehen. Wegen $|\mathbf{b}_\alpha| = 1$ sind Dipole somit auch ladungsneutral. Zur Bildung des ersten Dipols betrachtet man jede Versetzung und sucht die dazu nächstliegende Versetzung mit antiparallelem Burgers-Vektor. Jenes der möglichen Paare mit der geringsten Separation bildet den ersten Dipol. Zur Bildung des zweiten Paares geht man unter Vernachlässigung der beiden Versetzungen, die den ersten Dipol bilden, genauso vor. Nach genügend vielen Schritten hat man so alle Versetzungen eindeutig gepaart.

Die Wechselwirkung zwischen zwei Versetzungen eines Dipols mit Separation r wird durch Dipole mit kleiner Separation abgeschirmt. Dieser Effekt kann berücksichtigt werden, in dem man alle Dipole mit einer Separation kleiner als r nicht mehr als Ladungen, sondern nur noch als polarisierbares Medium auffaßt. Dieses Vorgehen führt zu einer Renormierung der physikalischen Größen wie der Kopplungskonstanten, deren Wert dann von r abhängt.

2.3 Bisherige Resultate

2.3.1 Wiedereintritt in die ungeordnete Phase

Die im letzten Abschnitt hergeleitete Hamiltonfunktion für das ungeordnete System (2.45) wurde bereits 1983 von Nelson untersucht [2]. Das wesentliche Resultat dieser Arbeit waren die folgenden Flußgleichungen, die mittels des Replikatricks und Renormierung, sowie mittels einer Näherung für kleine Werte der Fugazität y hergeleitet wurden:

$$\frac{dJ}{dl} = -\frac{3}{4}\pi \frac{J^2}{T} y^2 e^{\frac{JT - \bar{\sigma} J^2}{8\pi T^2}} \left(2I_0 \left(\frac{JT - \bar{\sigma} J^2}{8\pi T^2} \right) - I_1 \left(\frac{JT - \bar{\sigma} J^2}{8\pi T^2} \right) \right) \quad (2.46)$$

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{JT - \bar{\sigma} J^2}{8\pi T^2} \right) y + O(y^2) \quad (2.47)$$

$$\frac{d\sigma}{dl} = 0 \quad (2.48)$$

Es wird also eine Renormierung der Kopplungskonstante $J(l)$ und der Fugazität $y(l)$ gefunden, während die Unordnungsstärke σ unrenormiert bleibt. Vom Gittertyp hängt der Beitrag des zweiten Summanden in (2.47) ab, der hier mit $O(y^2)$ bezeichnet ist. Die sogenannte *Fugazität* y besitzt folgenden Ausgangswert

$$y_0 = y(r=1) = e^{-\frac{E_C}{T}} = e^{-\frac{(\bar{C}+1)J}{8\pi T}}. \quad (2.49)$$

Auf größeren Längenskalen $r := e^l$ ist die renormierte Fugazität $y = e^{-E_C(r)/T}$, wobei die renormierte Energie $E_C(r)$ eines Versetzungskerns seiner freien Energie $F_C = E_C - TS_C$ auf einer Fläche der Größe r^2 entspricht. Somit nimmt y^2 Werte

an, die proportional sind zur Wahrscheinlichkeit Versetzungsdipole zu finden und proportional zu r^4 sind, der Zahl der durch Renormierung verlorengegangenen möglichen Dipolpositionen (vgl. hierzu Kapitel 4). Ferner wurde eine neudefinierte Unordnungsstärke $\bar{\sigma} = \sigma \Omega_0^2$ und die üblichen modifizierten Besselfunktionen I_0 und I_1 verwendet. Für $\sigma \rightarrow 0$ stimmen obige Flußgleichungen mit jenen Gleichungen überein, die für Systeme ohne Unordnung gefunden wurden [13, 14].

Eine numerische Integration der Flußgleichungen liefert die in Abbildung 2.3 gezeigte Darstellung des Hamiltonianflusses.

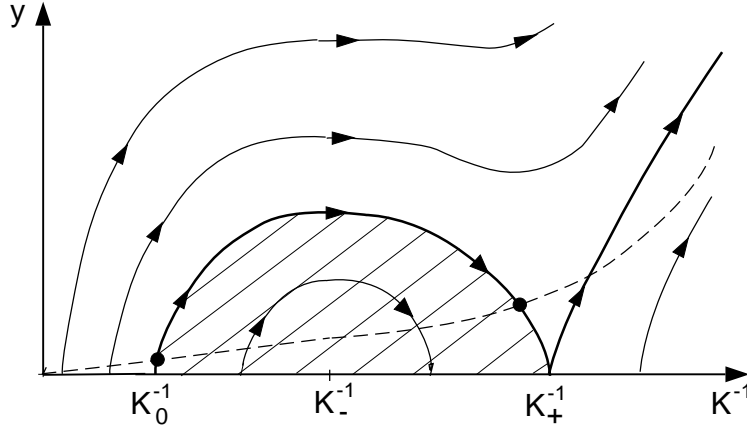


Abbildung 2.3: Hamiltonianfluß im Falle $0 < \bar{\sigma} < \bar{\sigma}_c$. Die gestrichelte Linie stellt die Anfangsbedingung y_0 dar. Ferner ist $K := \frac{1}{T}$.

Die Anfangsbedingungen sind durch die y_0 darstellende gestrichelte Linie gekennzeichnet. Auf der Achse $y = 0$ befinden sich zwei ausgezeichnete Punkte K_-^{-1} und K_+^{-1}

$$K_{\pm}^{-1} = \frac{1}{32\pi} \left[1 \pm (1 - 64\pi\bar{\sigma})^{1/2} \right]. \quad (2.50)$$

Nur für $K_-^{-1} < K^{-1} < K_+^{-1}$ geht der Fluß zur $y = 0$ -Linie hin, in allen anderen Fällen fließt er von dieser Linie weg. Die spezielle, dicker eingezeichnete, Linie, die die Fixlinie $y = 0$ bei K_0^{-1} verläßt und bei K_+^{-1} wieder in die Fixlinie einmündet, separiert zwei Phasen. Man nennt sie daher auch *Separatrix*. Im schraffierten Bereich liegt die feste Phase, da hier der Fluß immer bei $y = 0$ und endlichen Werten von K einmündet. Wegen der oben erwähnten Proportionalität zwischen der Fugazität y und der Dipolwahrscheinlichkeitsdichte gibt es auf großen Skalen offenbar keine Dipole mehr, alle Versetzungen sind zu Dipolen kleinerer Separation gebunden. Im nicht-schraffierten Bereich strebt der Fluß zu großen y -Werten; man hat also selbst für $r \rightarrow \infty$ eine hohe Dipolwahrscheinlichkeit. Ein Versetzungsdipol mit Separation $r \rightarrow \infty$ ist aber gleichbedeutend mit der Existenz freier Versetzungen, somit liegt hier die nicht-geordnete Phase vor.

Die feste Phase existiert offenbar nur für Unordnungsstärken, die kleiner sind

2.3. BISHERIGE RESULTATE

als eine kritische Stärke $\bar{\sigma}_c$

$$\bar{\sigma} \leq \bar{\sigma}_c = \frac{1}{64\pi}, \quad (2.51)$$

denn bei $\bar{\sigma}_c$ fallen K_-^{-1} und K_+^{-1} zusammen. Die realen Phasenübergangstemperaturen ergeben sich aus den Schnittpunkten der Anfangsbedingungs-Linie mit der Separatrix. Im Limes $E_C \rightarrow \infty$ fällt die obere kritische Temperatur dann mit K_+^{-1} zusammen. Deutlich wird, daß auch im Falle sehr geringer Unordnung $\bar{\sigma} > 0$ bei genügend tiefen Temperaturen ein *Wiedereintritt* in die ungeordnete Phase stattfindet. Das in Abbildung 1.5 dargestellte Phasendiagramm resultiert.

2.3.2 Scheitern der Näherung für kleine Fugazitäten

Nelson hat in obiger Arbeit [2] für die Wahrscheinlichkeit, einen Versetzungsdipol vorzufinden, durchweg eine bosonische *Boltzmann - Verteilung* angesetzt. Ein Versetzungsdipol der Separation $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ mit einem Winkel θ zwischen Abstandsvektor und Burgers-Vektoren (vgl. Abbildung 2.2) soll somit eine Wahrscheinlichkeit

$$P(r, \theta) \propto \left[\exp \left(-\frac{E_1(r, \theta)}{T} \right) \right]_D \quad (2.52)$$

haben. [...] $_D$ bedeutet wiederum eine Mittelung über alle Unordnungs-konfigurationen, während $E_1(r, \theta)$ die Energie eines solchen Versetzungsdipols mit $|\mathbf{b}| = 1$ ist. Nach (2.45) gilt

$$E_b(r, \theta) = \frac{J}{4\pi} b^2 (\ln r - \cos^2 \theta) + 2b^2 E_C + V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2), \quad (2.53)$$

mit

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_\alpha) &= \frac{J}{4\pi} \Omega_0 \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{e}_z [\mathbf{b}_\alpha \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha)]}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha)^2} \\ &= \frac{J}{4\pi} \Omega_0 \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) (\mathbf{e}_z \times \mathbf{b}_\alpha) \nabla \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha|. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Da die Energiekosten für Versetzungen mit $\propto b^2$ ansteigen, während ein möglicher Energiegewinn durch Wechselwirkung mit der Unordnung nur $\propto b$ sein kann, ist die Wahrscheinlichkeit Versetzungen mit einem Burgers-Vektor $|\mathbf{b}| > 1$ zu erzeugen verschwindend gering und wird im folgenden wie in (2.52) vernachlässigt.

Es ist zu beachten, daß die letzten beiden Terme der Unordnungs-Wechselwirkung in (2.53) $V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2)$ negative Werte annehmen können und sogar den gesamten Ausdruck $E_1(r, \theta)$ negativ machen können. Bei sehr tiefen Temperaturen dominieren solche Konfigurationen, hier ist also in den meisten Fällen $E_1(r, \theta) \gg T$ nicht mehr gewährleistet. Folglich ergeben sich hier auch sehr große Dipolwahrscheinlichkeiten $P(r, \theta) \gg 1$, was dazu führt, daß Wechselwirkung zwischen den Versetzungspaaren berücksichtigt werden müssen, man also kein verdünntes System mehr vorliegen hat. Insbesondere wird die in [2] durchgeführte Entwicklung nach kleinen Potenzen der Fugazität unhaltbar, ist y doch, wie bereits erwähnt, proportional zur Dipolwahrscheinlichkeit.

Daß diese Problematik zu einem unphysikalischen Verhalten führt, sollen die folgenden Abschätzungen zeigen. Entsprechend (2.47) gilt

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{J}{8\pi T} + \frac{\mathbf{J}^2 \bar{\sigma}}{8\pi T^2} \right) y + O(y^2). \quad (2.55)$$

Die $\frac{\bar{\sigma}}{T}$ -Proportionalität des fett gedruckten Terms ist für große Temperaturen plausibel, wird doch der Einfluß des Unordnungspotentials durch thermische Fluktuationen verringert. Im Fall $\bar{\sigma} > 0$ und $T \rightarrow 0$ jedoch führt dieser Term zu einem unbegrenzt starken Anwachsen von $\frac{dy}{dl}$ und damit, wie in Abschnitt 2.3.1 beschrieben, zu einem Wiedereintritt in die ungeordnete Phase. Der $O(y^2)$ -Term, der für das quadratische Gitter null ist, nimmt im Fall des Dreiecksgitters lediglich kleine positive Werte an und kann daher bei dieser Betrachtung übergangen werden.

Versetzungsdipole mit einer Größe zwischen r und $r + dr$ tragen mit dF_V zur freien Energie pro Einheitsfläche bei. Für $dr \rightarrow 0$ kann dieser Beitrag nach Kosterlitz [10] mittels

$$dF_V \approx -T r dr \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} d\theta [\ln Z]_D \quad (2.56)$$

angenähert werden (vgl. auch Scheidl [6] und Tang [5]). Hierbei ist Z die lokale Zustandssumme. Sie zählt bei gegebenen Versetzungspositionen, deren Separation im Intervall $[r, r + dr]$ liegt, die möglichen Dipole. Im Falle des Quadratgitters sind vier Einstellmöglichkeiten der Dipole zu berücksichtigen, beim Dreiecksgitter gibt es sechs Möglichkeiten.

Eine ausführliche Diskussion der Einstellmöglichkeiten und orientierten Dipolwahrscheinlichkeiten $P(r, \theta)$ erfolgt in Abschnitt 3.2 (vgl. insbesondere Abbildung 3.2). Nimmt man für das Quadratgitter analog zu Nelson kleine Fugazitäten und damit kleine Dipolwahrscheinlichkeiten an, so findet man wegen $\ln(1+x) \approx x$ für $x \ll 1$:

$$\begin{aligned} dF_V &= -\frac{T}{4} \int_0^{2\pi} d\theta r dr [P(r, \theta) + P(r, \theta + \frac{\pi}{2}) + P(r, \theta + \pi) + P(r, \theta + \frac{3\pi}{2})] \\ &= -T r dr \int_0^{2\pi} d\theta P(r, \theta) \end{aligned} \quad (2.57)$$

Setzt man eine Boltzmann-verteilte Wahrscheinlichkeit $P(r, \theta) \propto r^{-\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T})} e^{\frac{J}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T}) \cos^2 \theta}$ an, so folgt

$$dF_V \propto -\pi T r dr r^{-\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T})} e^{\frac{J}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T})} I_0 \left(\frac{J}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}}{T} \right) \right). \quad (2.58)$$

Unter Benutzung der von Nelson verwendeten Relation für die Fugazität $y^2(r) = r^4 r^{-\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T})}$ ergibt sich für das Skalenverhalten der freien Energie

$$\frac{dF_V}{dl} \propto -\pi T \frac{y^2}{r^2} e^{\frac{J}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{T})} I_0 \left(\frac{J}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}}{T} \right) \right). \quad (2.59)$$

Im Fall des Dreieckgitters findet man in niedrigster Ordnung, abgesehen von einem anderem konstanten Vorfaktor, dasselbe Resultat. Formal wurde dieses Ergebnis bereits von Kosterlitz [10] für das XY-Modell ohne Unordnung und von Tang [5] und Scheidl [6] für den Bereich hoher Temperaturen des XY-Modells mit Unordnung gefunden, ihre Resultate unterscheiden sich lediglich durch Faktoren.

Mittels der Beziehung $\frac{dS_V}{dl} = -\frac{\partial}{\partial T} \frac{dF_V}{dl}$ ist es nun möglich das Skalenverhalten der Entropie zu untersuchen. Hierbei ist es nicht nötig die beiden hinteren Faktoren aus Gleichung (2.59) zu betrachten, da sie auf großen Längenskalen $\ln r \gg \bar{\sigma}$ und $\ln r \gg \frac{E_C}{J}$ (nur hier gelten auch die verwendeten Relationen für z.B. die Wahrscheinlichkeit) nicht zum physikalischen Verhalten beitragen. Somit würde eine Berücksichtigung dieser Faktoren die Rechnung unübersichtlicher machen, aber das Ergebnis *nicht* beeinflussen.

Wir berechnen also lediglich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T}(Ty^2) &= y^2 + T \frac{\partial}{\partial T} y^2 \\ &= y^2 + \frac{J}{4\pi T^2} l (T - 2\bar{\sigma}J) y^2 \end{aligned} \quad (2.60)$$

Hieraus folgt, daß die Entropie im Falle $T < T^* = 2J\bar{\sigma}$ und für $\bar{\sigma} \leq \bar{\sigma}_c$ unbeschränkt abnimmt. Vernachlässigt wurde bisher die bei $l > 0$ vorhandene implizite Temperaturabhängigkeit der abgeschirmten Größe J . Wie Scheidl [6] bereits ausgearbeitet hat, können diese impliziten Abhängigkeiten berücksichtigt werden, indem man die Größe $\frac{\partial}{\partial T} \frac{d}{dl}(Ty^2)$ berechnet. Sind sowohl $\frac{\partial}{\partial T}(Ty^2)$ als auch $\frac{\partial}{\partial T} \frac{d}{dl}(Ty^2)$ positiv, so ist der Entropiefluß auf jeden Fall positiv, da die T -Abhängigkeit von J eine Konsequenz der Abschirmung ist. Sind beide Ausdrücke negativ, liegt auch ein negativer Entropiefluß vor.

Anstelle von $\frac{\partial}{\partial T} \frac{d}{dl}(Ty^2)$ kann man ebenso

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{d}{dl} \ln(Ty^2) = \frac{J}{4\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}}{T} \right) - \frac{J^2\bar{\sigma}}{16\pi T^3} + O(y^2) \quad (2.61)$$

berechnen. Für $T \geq T^*$ ist der Entropiefluß somit tatsächlich nicht negativ. Die unbeschränkte Abnahme der Entropie im Fall $T < T^* = 2J\bar{\sigma}$ bestätigt sich allerdings. Auf großen Längenskalen führt dies zu einer *negativen* Entropie. Dieses Verhalten ist offenbar eine Konsequenz der unkorrekten Näherung für kleine Fugazitäten. Es ist daher notwendig den gesamten Bereich, in dem $T < T^*(\bar{\sigma})$ gilt neu zu untersuchen. Da $T^*(\bar{\sigma})$ die Phasengrenze gerade bei $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_c$ schneidet (vgl. Abbildung 1.6) fällt der gesamte Bereich des Wiedereintritts in die ungeordnete Phase darunter.

2.4 Abschätzung der Phasengrenze

In diesem Abschnitt soll die Phasengrenze im neu zu untersuchenden Bereich $T < T^*(\bar{\sigma})$ abgeschätzt werden.

Da ein Phasenübergang in die ungeordnete Phase, in der Versetzungen nicht mehr zu Dipolen gebunden sind, mit der Möglichkeit der Entstehung freier

2.4. ABSCHÄTZUNG DER PHASENGRENZE

Versetzungen durch thermische Fluktuationen gleichzusetzen ist, untersuchen wir zunächst das System bei $T = 0$ und schwacher Unordnung darauf, ob das Unordnungspotential hier die spontane Entstehung von Versetzungen ermöglichen kann. Die Energie einer einzelnen Versetzung in einem System der Fläche $R \times R$ ohne Unordnung ist, wie man aus (2.30) berechnen kann (vgl. [11, 27])

$$E_{el} = \frac{J}{8\pi} \ln R. \quad (2.62)$$

Dies ist zu vergleichen mit dem möglichen Energiegewinn E_D durch die Wechselwirkung $V(\mathbf{r})$ zwischen der freien Versetzung und der Unordnung. Diese Wechselwirkung ist gaußverteilt, da auch die Funktion $\delta c(\mathbf{r})$ eine solche Verteilung aufweist. Die Varianz $\omega(R)$ der Wechselwirkung läßt sich mit Formel (2.54) berechnen (vgl. Anhang B)

$$\omega(R) = [V(\mathbf{r}_\alpha)^2]_D = \frac{J^2}{16\pi} \bar{\sigma} \ln R. \quad (2.63)$$

Der *typische* Energiegewinn durch diese Wechselwirkung ist also

$$E_D^{(typ)} = -J \left(\frac{\bar{\sigma}}{16\pi} \ln R \right)^{1/2}, \quad (2.64)$$

und die freie Energie der einzelnen Versetzung ist damit:

$$F = \frac{J}{8\pi} \ln R - 2T \ln R - J \left(\frac{\bar{\sigma}}{16\pi} \ln R \right)^{1/2}. \quad (2.65)$$

Der zweite Term resultiert aus der Entropie, die $S = \ln(R^2)$ beträgt, da eine einzelne Versetzung R^2 Plätze im System einnehmen kann. Vergleicht man bei $T \rightarrow 0$ den ersten mit dem letzten Term, so zeigt sich, daß bei schwacher Unordnung $\bar{\sigma} \ll 1$ die Entstehung freier Versetzungen nicht zu erwarten ist. Möchte man aber rigoros ausschließen, daß das Unordnungspotential die Entstehung freier Versetzung induzieren kann, so muß man nicht den typischen, sondern den maximal möglichen Energiegewinn $E_D^{(max)}$ der Wechselwirkung untersuchen. Dieser ist dann geben, wenn die Versetzung ihre energetisch günstigste Position im System einnimmt.

Hierzu folgen wir der Methode von Korshunov und Nattermann [28] und vernachlässigen die Korrelationen zwischen den Werten des Unordnungspotentials an den verschiedenen Positionen. Wir betrachten also R^2 unabhängige Variable $V(\mathbf{r})$ die jeweils dieselbe Gaußverteilung

$$p(V) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega}} \exp\left(-\frac{V^2}{2\omega}\right) \quad (2.66)$$

aufweisen. Die Wahrscheinlichkeit genau den Wert $E_D^{(max)}$ als Maximalwert zu finden ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeit, ihn an einem Platz vorzufinden, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, daß alle anderen Plätze eine geringere Energie aufweisen und multipliziert mit der Anzahl der Plätze R^2 . Die Verteilung

2.4. ABSCHÄTZUNG DER PHASENGRENZE

von $E_D^{(max)}$ ist also

$$\begin{aligned} P(E_D^{(max)}) &= p(E_D^{(max)}) \left[\int_{-\infty}^{E_{D^{max}}} dV p(V) \right]^{R^2-1} R^2 \\ &= \frac{d}{dE_D^{(max)}} \left[\int_{-\infty}^{E_{D^{max}}} dV p(V) \right]^{R^2}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Völlig analog zu [28] läßt sich das Maximum dieser Verteilung berechnen, das wegen der geringen Breite dieser nicht-gaußischen Verteilung mit dem wahrscheinlichsten Wert der Verteilung gleich gesetzt werden kann. Man findet

$$\overline{E_D^{(max)}} \approx \sqrt{2\omega \ln R^2}. \quad (2.68)$$

Einsetzen von $\omega(R)$ liefert für die gemittelte freie Energie einer Versetzung, die sich am energetisch günstigsten Platz des Systems befindet

$$F = \frac{J}{8\pi} \left(1 - \sqrt{16\pi\bar{\sigma}} \right) \ln R. \quad (2.69)$$

Auch diese Gleichung zeigt, daß für $T \rightarrow 0$ und kleine Unordnungsstärke immer noch eine im Falle $R \rightarrow \infty$ unendliche Energie aufgebracht werden muß, um eine freie Versetzung zu erzeugen. Erst bei Unordnungsstärken $\bar{\sigma} > \frac{1}{16\pi}$ kann eine freie Versetzung die Energie des Systems absenken und daher sind ab diesem Wert ungebundene Versetzungen auch zu erwarten.

Zusätzlich zu obigen Betrachtungen kann untersucht werden, bis zu welcher Unordnungsstärke es bei $T = 0$ energetisch günstig ist, gebundene Versetzungsdipole zu erzeugen. Auch die Wechselwirkung eines solchen Paares mit der Unordnung ist gaußverteilt. Die Varianz dieser Verteilung ist wegen (2.53) für einen Dipol mit der Separation $r = |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|$ gegeben durch $\Delta^2(r, \theta) = [(V(\mathbf{r}_\alpha) + V(\mathbf{r}_\beta))^2]_D$. Beachtet man die Translationsinvarianz im System, so erhält man nach einiger Rechnung (vgl. Anhang B) für Separationen $r \gg 1$

$$\begin{aligned} \Delta^2(r, \theta) &= [(V(\mathbf{r}) + V(\mathbf{0}))^2]_D = 2[V(\mathbf{0})V(\mathbf{0}) + V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D \\ &= \frac{J^2\bar{\sigma}}{8\pi} (\ln r - \cos^2 \theta), \end{aligned} \quad (2.70)$$

hierbei ist θ wiederum der Winkel zwischen den Burgers-Vektoren und dem Abstandsvektor.

Da die elastische Energie eines Versetzungsdipols durch

$$E_{el} = \frac{J}{4\pi} \ln r - \frac{J}{4\pi} \cos^2 \theta + 2E_C \quad (2.71)$$

gegeben ist, kann die Erzeugung eines solchen Dipols bei $T = 0$ nur dann energetisch günstig sein, wenn die Wechselwirkung mit der Unordnung die Energiekosten durch E_{el} aufhebt. Aufgrund der Definition von E_C (vgl. Anhang A.1), kann E_{el} selbst nicht negativ werden. Entsprechend Abbildung 2.4 muß also der Betrag dieser Wechselwirkung V im schraffierten Bereich liegen.

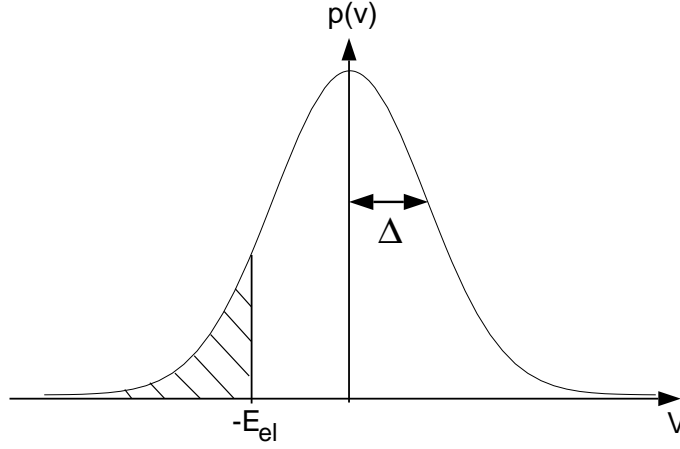


Abbildung 2.4: Gaußverteilung der Unordnungswechselwirkung eines Versetzungsdipols

Daher ist die Wahrscheinlichkeit einen Versetzungsdipol mit Burgersvektor \mathbf{b} bei \mathbf{r}_α und mit $-\mathbf{b}$ bei \mathbf{r}_β zu finden

$$\begin{aligned}
 P(r, \theta) &= \int_{-\infty}^{-E_{el}} \frac{dV}{\sqrt{2\pi}\Delta} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \\
 &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \frac{\Delta^2}{E_{el}} e^{-\frac{E_{el}^2}{2\Delta^2}} \\
 &= \sqrt{\frac{\Delta^2}{2\pi E_{el}^2}} e^{-\frac{E_{el}^2}{2\Delta^2}},
 \end{aligned} \tag{2.72}$$

wobei $\ln r \gg \bar{\sigma}$ angenommen wurde. Setzt man hier die Ausdrücke für Δ^2 und E_{el} ein, so resultiert, da man für große r die Energie der Versetzungskerne vernachlässigen kann ($J \ln r \gg E_C$, $\ln r \gg 1$),

$$P(r, \theta) \approx \sqrt{\frac{\bar{\sigma}}{\ln r - \cos^2 \theta}} r^{-\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}}} e^{\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}} \cos^2 \theta}. \tag{2.73}$$

Die Anzahl der möglichen Plätze für einen Versetzungsdipol mit großer Separation r skaliert $\propto r^4$. Berücksichtigt man nur die wesentlichen Abhängigkeiten in r , so zeigt sich, daß die Zahl der Plätze P , für die es energetisch vorteilhaft ist, einen Versetzungsdipol zu erzeugen, wie folgt skaliert

$$P \propto r^4 r^{-\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}}}. \tag{2.74}$$

Auch hier stellt man fest, daß im Falle $\bar{\sigma} > \frac{1}{16\pi}$ die Zahl der Dipole mit der Längenskala r ansteigt, auf beliebig großen Skalen also auch beliebig viele Dipole erzeugt werden. Wie in Abschnitt 2.3.1 erklärt, befindet man sich somit in der ungeordneten Phase. Für $\bar{\sigma} < \frac{1}{16\pi}$ hingegen findet man das in der festen Phase

2.4. ABSCHÄTZUNG DER PHASENGRENZE

zu erwartende Verhalten. Diese Berechnung wie auch die vorherige Abschätzung zeigen, daß die kritische Unordnungsstärke, oberhalb der keine feste Phase mit quasi-langreichweitiger Translationsordnung mehr bestehen kann, bei

$$\bar{\sigma}_c = \frac{1}{16\pi} \quad (2.75)$$

liegt. Dies steht im Widerspruch zu der von Nelson [2] gefundenen kritischen Unordnungsstärke von $\frac{1}{64\pi}$. Dieser Unterschied resultiert aus einem Rechenfehler in [2], auch im folgenden werden für $T > T^*$ die von Nelson gefundenen Flußgleichungen mit einer um den Faktor 4 stärkeren Unordnung reproduziert. Der Wert $\bar{\sigma}_c = \frac{1}{16\pi}$ ist ebenso von Cha und Fertig [7] gefunden worden. Dem entsprechend ergibt sich für den Wert von T^* jetzt

$$T^* = \frac{J\bar{\sigma}}{2}. \quad (2.76)$$

Aufgrund vorangegangener Abschätzungen ist im gesamten Bereich $T < T^*$ eine Phasengrenze zu erwarten, die bei $\bar{\sigma}_c$ parallel zur T-Achse verläuft (vgl. Abbildung 1.6). Dieser Verlauf würde im Gegensatz zu [2] nicht den Ergebnissen von Ozeki und Nishimori [20] widersprechen, die einen Wiedereintritt in die ungeordnete Phase ausschließen konnten und zeigten, daß die Phasengrenze bei tiefen T parallel zur Temperatur-Achse verlaufen muß, falls eine Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung überhaupt existiert.

Kapitel 3

Dielektrischer Formalismus

In Abschnitt 2.2.1 wurde der Zusammenhang zwischen der zweidimensionalen Elektrodynamik und dem vorliegenden Problem dargestellt. Wie in der Elektrodynamik, kann man bei der Renormierung das Verhalten auf größeren Längenskalen r mittels einer *dielektrischen Konstanten* $\varepsilon(r)$ beschreiben, die die Polarisierbarkeit von Versetzungspaaren kleinerer Separation berücksichtigt. Da die Wahrscheinlichkeit, gebundene Versetzungen zu finden, in der geordneten Phase für $r \rightarrow \infty$ gegen null geht, ist hier ein endlicher Wert für $\varepsilon(r)$ zu erwarten, während in der ungeordneten Phase eine Divergenz der dielektrischen Konstante auf großen Längenskalen auftritt.

Fordert man im noch nicht renormierten Gitter die Gültigkeit der üblichen elektrodynamischen Beziehung

$$\nabla^4 \chi(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\eta(\mathbf{r})}{\varepsilon_0}, \quad (3.1)$$

so gilt offenbar $\varepsilon_0 = \varepsilon(1) = 4\pi/J$. Mit Hilfe dieser Relation kann man eine renormierte Kopplungskonstante $J(r)$ für beliebige Längenskalen definieren

$$J(r) := \frac{4\pi}{\varepsilon(r)}. \quad (3.2)$$

Eine Multipolentwicklung [9] der Verzerrungsfunktion $\chi(\mathbf{r})$ gibt Aufschluß über die Struktur der dielektrischen Konstanten.

3.1 Multipolentwicklung

Mit der am Ende von Abschnitt 2.2 geschilderten Vorgehensweise kann man alle Versetzungen im System bei tiefen Temperaturen und kleiner Unordnungsstärke eindeutig zu Dipolen paaren.

Für eine beliebige Länge ζ können nun die Versetzungen in zwei Gruppen unterteilt werden. Die erste Gruppe besteht aus den Versetzungen, die zu Dipolen

3.1. MULTIPOLENTWICKLUNG

mit einer Separation $r < \zeta$ gebunden sind, die zweite aus denen, die größere Dipole bilden. Indiziert man die erste Gruppe mit Γ und bezeichnet die Versetzungen, aus denen der Dipol Γ besteht mit \mathbf{r}_{Γ_1} und \mathbf{r}_{Γ_2} , so liegt dessen Dipolzentrum bei

$$\mathbf{r}_\Gamma := \frac{1}{2} (\mathbf{r}_{\Gamma_1} + \mathbf{r}_{\Gamma_2}). \quad (3.3)$$

Die Quellenfunktion $\eta(\mathbf{r}) = \epsilon_{ij} \nabla_i \sum_\alpha b_{\alpha,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha)$ unterteilt sich somit wie folgt:

$$\eta(\mathbf{r}) = \eta_{ex}(\mathbf{r}) + \sum_\Gamma \eta_\Gamma(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

wobei

$$\begin{aligned} \eta_{ex}(\mathbf{r}) &= \epsilon_{ij} \nabla_i \sum_{\bar{\alpha}} b_{\bar{\alpha},j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\bar{\alpha}}) \\ \eta_\Gamma(\mathbf{r}) &= \epsilon_{ij} \nabla_i (b_{\Gamma_1,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_1}) + b_{\Gamma_2,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_2})) \\ &= \epsilon_{ij} \nabla_i b_{\Gamma_1,j} (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_1}) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_2})). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Hierbei ist $\sum_{\bar{\alpha}}$ eine Summation über alle Versetzungen, die nicht zu Dipolen mit einer Größe $r < \zeta$ gebunden sind, also der zweiten Gruppe angehören. Zu beachten ist, daß die Anzahl der Versetzungen, die in $\eta_{ex}(\mathbf{r})$ eingehen, von dem Wert von ζ abhängt. Falls ζ so groß gewählt ist, daß alle Versetzungen Dipole mit $r < \zeta$ bilden, so ist $\eta_{ex}(\mathbf{r}) = 0$. Nach (2.39) kann man die Verzerrungsfunktion nun ebenso wie die Quellenfunktion aufteilen $\chi(\mathbf{r}) = \chi_{ex}(\mathbf{r}) + \sum_\Gamma \chi_\Gamma(\mathbf{r})$. Der Beitrag des Dipols Γ zur Gesamtverzerrungsfunktion ist

$$\chi_\Gamma(\mathbf{r}) = J \int d^2 r' \eta_\Gamma(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.6)$$

Im folgenden wird der Beitrag des Dipols Γ zur Verzerrungsfunktion an einem genügend weit entfernten Ort \mathbf{r} mittels einer Multipolentwicklung abgeschätzt [9]. Diese wird für jeden Dipol durchgeführt und die Beiträge der Entwicklungen schließlich summiert. Wie im Anhang A.2 gezeigt wird entspricht dieses Vorgehen dem der Elektrodynamik.

Zunächst ist es zweckmäßig, zu einer Darstellung mit inneren Koordinaten $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ des Dipols Γ überzugehen.

$$\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)} := \mathbf{r}' - \mathbf{r}_\Gamma \quad (3.7)$$

Abbildung 3.1 verdeutlicht die vorliegende Situation. In inneren Koordinaten liegen die Versetzungen des Dipols Γ bei $\boldsymbol{\rho}_1^{(\Gamma)} = \mathbf{r}_{\Gamma_1} - \mathbf{r}_\Gamma$ und $\boldsymbol{\rho}_2^{(\Gamma)} = \mathbf{r}_{\Gamma_2} - \mathbf{r}_\Gamma$.

In inneren Koordinaten wird aus (3.6)

$$\chi_\Gamma(\mathbf{r}) = J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \eta_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)} + \mathbf{r}_\Gamma) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma - \boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}). \quad (3.8)$$

Definiert man schließlich die Quellenfunktion mit $\tilde{\eta}_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) := \eta_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)} + \mathbf{r}_\Gamma)$ um, so erhält man

$$\chi_\Gamma(\mathbf{r}) = J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma - \boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}). \quad (3.9)$$

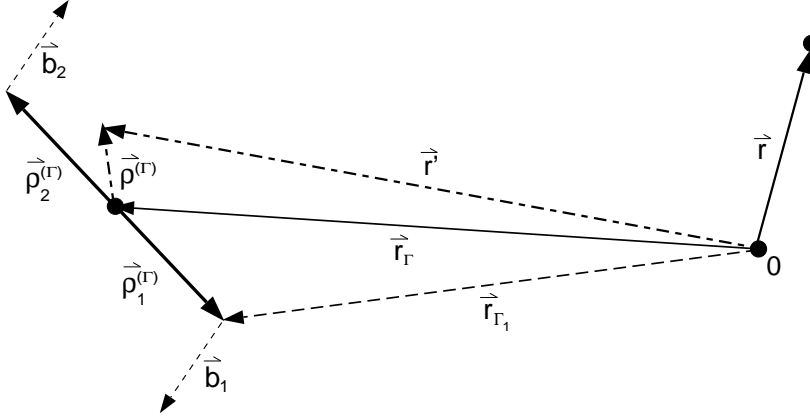


Abbildung 3.1: Ein Dipol mit Zentrum bei \mathbf{r}_Γ liefert einen Beitrag zur Verzerrungsfunktion am Punkt \mathbf{r} . Die innere Koordinate $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ wird vom Zentrum aus gemessen.

Da $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ eine interne Koordinate des Dipols ist, gilt in genügend großem Abstand vom Dipol $|\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}| \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma|$. Somit kann obige Beziehung nach $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ entwickelt werden.

$$\begin{aligned} \chi_\Gamma(\mathbf{r}) = & J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma) \\ & + \frac{1}{2} J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \rho^{(\Gamma)}_i \rho^{(\Gamma)}_j \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma)}{\partial x_{\Gamma i} \partial x_{\Gamma j}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Hierbei handelt es sich um eine übliche Multipolentwicklung in zwei Dimensionen. Zu beachten ist, daß man die Ableitungen der Green-Funktion nach Komponenten von $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ durch Ableitungen nach \mathbf{r}_Γ ersetzen kann. Ein Term erster Ordnung der Form

$$J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_\Gamma(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \rho^{(\Gamma)}_i \frac{\partial g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\Gamma)}{\partial x_{\Gamma i}} \quad (3.11)$$

tritt hier nicht auf. Einsetzen der Quellenfunktion für einen Dipol zeigt sofort, daß er null ist. Wie bereits in Abschnitt 2.2.1 angemerkt, muß hier verglichen mit der Elektrodynamik doppelt so oft abgeleitet werden. Aus diesem Grund hat der Dipolterm obiger Multipolentwicklung die Form des klassischen Quadrupolterms.

Der Gesamtbeitrag aller Dipole mit $r < \zeta$ zur Verzerrungsfunktion am Ort \mathbf{r} ist

3.1. MULTIPOLENTWICKLUNG

damit

$$\begin{aligned}
\chi^{Dip}(\mathbf{r}) &= \sum_{\Gamma} \chi_{\Gamma}(\mathbf{r}) \\
&= J \sum_{\Gamma} \left(\int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{J}{2} \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \rho^{(\Gamma)}{}_i \rho^{(\Gamma)}{}_j \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma})}{\partial x_{\Gamma i} \partial x_{\Gamma j}} \right) \\
&= J \int d^2 r' \eta^{Dip}(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + J \int d^2 r' C_{ij}^{Dip}(\mathbf{r}') \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x'_i \partial x'_j},
\end{aligned} \tag{3.12}$$

wobei

$$\eta^{Dip}(\mathbf{r}') = \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma}), \tag{3.13}$$

$$C_{ij}^{Dip}(\mathbf{r}') = \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \rho^{(\Gamma)}{}_i \rho^{(\Gamma)}{}_j \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma}). \tag{3.14}$$

Möchte man nun eine makroskopische Verzerrungsfunktion erhalten, so ist über Flächen $\Delta A \gg \zeta^2$ zu mitteln. Danach treten Dipole mit einer Separation $r < \zeta$ nur noch als polarisierbares Dielektrikum auf. Da eine Mittelung einer Größe $B(\mathbf{r})$ über eine Fläche ΔA allgemein die Form $\langle B(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\Delta A} \int_{\Delta A} d^2 \xi B(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi})$ besitzt, finden wir exemplarisch für den ersten Term von (3.12)

$$\begin{aligned}
\langle \chi_1^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{J}{\Delta A} \int_{\Delta A} d^2 \xi \int d^2 r' \eta^{Dip}(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi} - \mathbf{r}') \\
&= \frac{J}{\Delta A} \int_{\Delta A} d^2 \xi \int d^2 r'' \eta^{Dip}(\mathbf{r}'' + \boldsymbol{\xi}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\
&= J \int d^2 r'' \langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}'') \rangle g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'').
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Die hier auftretende Mittelung von (3.13) ist

$$\langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{\Delta A} \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \int_{\Delta A} d^2 \xi \delta(\mathbf{r}' + \boldsymbol{\xi} - \mathbf{r}_{\Gamma}). \tag{3.16}$$

Die δ -Funktion gibt für einen Dipol Γ nur dann einen Beitrag, wenn dessen Zentrum \mathbf{r}_{Γ} innerhalb der Fläche ΔA um \mathbf{r}' liegt. Da $\Delta A \gg \zeta$ gilt, ist die Zahl der Dipole, die vollständig in ΔA liegen wesentlich größer als die Zahl der Dipole, die nur zur Hälfte, das heißt mit nur einer Versetzung in dieser Fläche liegen.

Die bisher betrachtete Mittelung pro Flächeneinheit ist geeignet für makroskopische Felder. Die Größe $\eta^{Dip}(\mathbf{r}')$ läßt sich aber auch pro Dipol mitteln. Ist ΔN die mittlere Zahl von Dipolen mit $r < \zeta$ in einer Fläche der Größe ΔA , so hat eine solche Mittelung die Form

$$\langle B(\mathbf{r}) \rangle_{\Delta N} = \frac{1}{\Delta N} \int_{\Delta A} d^2 \xi B(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}). \tag{3.17}$$

Mit der makroskopische Dipoldichte $n^\zeta(\mathbf{r}')$ bei \mathbf{r}' erhält man

$$\langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}') \rangle = \langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}') \rangle_{\Delta N} n^\zeta(\mathbf{r}'). \quad (3.18)$$

Schreibt man die makroskop. Verzerrungsfunktion $\chi(\mathbf{r}) = \chi_{ex}(\mathbf{r}) + [\langle \chi(\mathbf{r}) \rangle]_D$ in der Form

$$\chi(\mathbf{r}) \approx J \int d^2 r' \eta^\zeta(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + J \int d^2 r' C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}') \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x'_i \partial x'_j}, \quad (3.19)$$

so ergibt sich für die makroskopische Quellenfunktion nach einer zusätzlichen Mittelung über die Unordnung $[\dots]_D$ entsprechend (3.4), (3.13) und (3.18)

$$\eta^\zeta(\mathbf{r}) = \left[\left\langle \sum_{\Gamma} \int d^2 r' \tilde{\eta}_{\Gamma}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) \right\rangle_{\Delta N} n^\zeta(\mathbf{r}) \right]_D + \eta_{ex}(\mathbf{r}). \quad (3.20)$$

Geht man für den zweiten (3.12) analog zum ersten Term vor, erhält man den Tensor C_{ij} auf makroskopischem Niveau, der der elektrischen Polarisation entspricht

$$C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\left\langle \sum_{\Gamma} \int d^2 r' \tilde{\eta}_{\Gamma}(\mathbf{r}') x'_i x'_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) \right\rangle_{\Delta N} n^\zeta(\mathbf{r}) \right]_D. \quad (3.21)$$

Partielle Integration und Ableiten liefern aus (3.19)

$$\begin{aligned} \nabla^4 \chi(\mathbf{r}) &= J \eta^\zeta(\mathbf{r}) + J \int d^2 r' \frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j} C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= J \eta^\zeta(\mathbf{r}) + J \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

In der Elektrodynamik ist die Polarisation eine Funktion des elektrischen Felds und damit eine Funktion der Ableitung des elektrostatischen Potentials. Analog dazu ist der Tensor C_{ij} hier eine Funktion der zweifachen Ableitung der Verzerrungsfunktion

$$C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}) = \sum_{kl} a_{ijkl}(\zeta) \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_l} + \sum_{klmn} b_{ijklmn}(\zeta) \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_l} \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_m \partial x_n} + \dots \quad (3.23)$$

Berücksichtigt man nur den ersten Term und setzt ein isotropes Medium oder ein Dreiecksgitter an, so gilt in symmetrisierter Form

$$C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} C_1(\zeta) \left(\frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_i} \right) + C_2(\zeta) \delta_{ij} \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial^2 x_k}. \quad (3.24)$$

Diese spezielle Form von $a_{ijkl}(\zeta)$ beruht auf der Tatsache, daß dieser Tensor - wie schon der Tensor K_{ijkl} aus (2.5) - den Gitterinvarianzen genügen muß. Eingesetzt mit (3.22) ergibt sich jetzt

$$\begin{aligned} \varepsilon(\zeta) \nabla^4 \chi(\mathbf{r}) &= 4\pi \eta^\zeta(\mathbf{r}) \\ &= \frac{4\pi}{J} \nabla^4 \chi(\mathbf{r}) - 4\pi (C_1(\zeta) + C_2(\zeta)) \nabla^4 \chi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.2. DIPOL-WAHRSCHEINLICHKEIT

Wir haben nun einen Ausdruck für die dielektrische Konstante gefunden, nämlich

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_0 - 4\pi(C_1(r) + C_2(r)). \quad (3.26)$$

Ein Vergleich mit der üblichen Formulierung der Elektrodynamik zeigt, daß $-C_1 - C_2$ somit einer elektrischen Suszeptibilität κ entspricht, die sich durch eine Dipolwahrscheinlichkeit $P(r, \theta)$ und eine Dipolpolarisierbarkeit $\alpha(r, \theta)$ für Dipole mit Separation r und Winkel θ wie folgt ausdrücken läßt

$$\kappa(r) = -C_1 - C_2 = \int_0^r d^2r' [P(r', \theta) \alpha(r', \theta)]_D. \quad (3.27)$$

Ziel der folgenden Abschnitte ist es die relevanten Größen zu bestimmen, so daß mittels eines expliziten Ausdruckes für die dielektrische Konstante $\varepsilon(r)$ der Renormierungsfluß der Kopplungskonstanten $J(r)$ hergeleitet werden kann.

3.2 Dipol-Wahrscheinlichkeit

Im folgenden soll die Wahrscheinlichkeit $P(r, \theta)$ bestimmt werden, einen Versetzungsdipol mit Burgersvektoren \mathbf{b} bei \mathbf{r}_α und $-\mathbf{b}$ bei \mathbf{r}_β zu finden. Der Winkel θ ist wiederum der Winkel zwischen Abstandsvektor und Burgers-Vektoren, ferner ist $r = |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|$ die Dipolgröße.

Für das weitere Vorgehen beschränken wir uns auf die Untersuchung des Quadratgitters. Die meisten Argumente können unverändert für das Dreiecksgitter übernommen werden, notwendige Modifikationen werden in Kapitel 4 untersucht. Offenbar existieren vier mögliche Orientierungen für einen Dipol mit Burgers-Vektoren bei \mathbf{r}_α und \mathbf{r}_β , die in Abbildung 3.2 dargestellt sind.

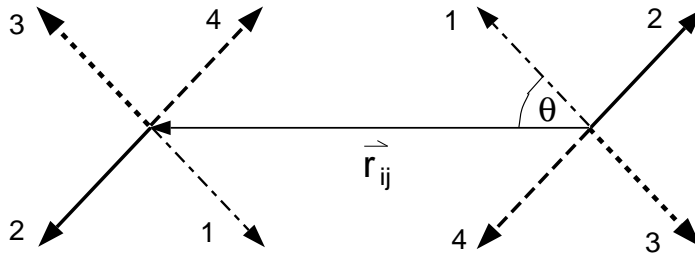


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der möglichen Orientierungen eines Dipols auf dem Quadratgitter

Die mit 1 und 3 gekennzeichneten Einstellungen haben beide die elastische Energie

$$E = \frac{J}{4\pi} \ln r - \frac{J}{4\pi} \cos^2 \theta + 2E_C, \quad (3.28)$$

3.2. DIPOL-WAHRSCHEINLICHKEIT

und einen Beitrag aus der Wechselwirkung mit der Unordnung von V , beziehungsweise von $-V$. Für die Einstellungen 2 und 4 ist

$$\tilde{E} = E \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) = \frac{J}{4\pi} \ln r - \frac{J}{4\pi} \sin^2 \theta + 2E_C, \quad (3.29)$$

während die Unordnungs-Wechselwirkung hier mit \tilde{V} oder $-\tilde{V}$ angesetzt wird. Berücksichtigt man die Möglichkeit, daß kein Dipolpaar gebildet wird (Gewicht = 1, da keine Energie), so lautet die lokale Zustandssumme

$$Z = 1 + w_+ + w_- + \tilde{w}_+ + \tilde{w}_-, \quad (3.30)$$

wobei die Gewichte durch

$$w_{\pm} = e^{-\beta(E \pm V)} \quad \text{und} \quad \tilde{w}_{\pm} = e^{-\beta(\tilde{E} \pm \tilde{V})} \quad (3.31)$$

gegeben sind. Somit ist die normierte Wahrscheinlichkeit ein *orientiertes* Paar mit dem Vektor θ zwischen Burgers-Vektoren und Abstandsvektor zu finden (das sind die Einstellungen 1 und 3 aus Abbildung 3.2)

$$P(r, \theta) = \frac{1}{2} \left[\frac{w_+ + w_-}{1 + w_+ + w_- + \tilde{w}_+ + \tilde{w}_-} \right]_D. \quad (3.32)$$

Da die Berechnung dieses Ausdrucks recht aufwendig ist, vergleichen wir ihn mit der Wahrscheinlichkeit $p(r, \theta)$, die gegeben wäre, gäbe es nur die Orientierungsmöglichkeiten 1 und 3. Dann wäre die Wahrscheinlichkeit p

$$p(r, \theta) = \frac{1}{2} \left[\frac{w_+ + w_-}{1 + w_+ + w_-} \right]_D. \quad (3.33)$$

Offenbar ergibt sich direkt aus (3.32) und (3.33)

$$P(r, \theta) \leq p(r, \theta). \quad (3.34)$$

Da die Gesamtwahrscheinlichkeit Dipole mit Abstand r zu finden durch zusätzliche Einstellmöglichkeiten auf keinen Fall absinken kann, muß auch die winkelmittelte Dipolwahrscheinlichkeit $P(r)$ mit vier erlaubten Burgers-Vektorrichtungen größer sein, als die winkelmittelte Wahrscheinlichkeit $p(r)$ für nur zwei erlaubte Vektorrichtungen. Es ist

$$P(r) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} [2P(r, \theta) + 2P(r, \theta + \pi/2)] = 4 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} P(r, \theta) \quad (3.35)$$

$$p(r) = 2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} p(r, \theta). \quad (3.36)$$

Mit (3.34) folgt hieraus die Ungleichung

$$\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} p(r, \theta) \leq \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} P(r, \theta) \leq \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} p(r, \theta). \quad (3.37)$$

Da aber im folgenden Vorfaktoren nicht wesentlich sind (auch in [3] wurden nur die Hauptabhängigkeiten betrachtet), können wir somit als Näherung

$$P(r) \propto p(r) = 2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} p(r, \theta) \quad (3.38)$$

ansetzen.

3.2.1 Wahrscheinlichkeit bei $T = 0$

Setzt man die Gewichte ein, so liefert (3.38)

$$\begin{aligned}
 p(r, \theta) &= \frac{1}{2} 2 \int_0^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \frac{e^{-\beta(E+V)} + e^{-\beta(E-V)}}{1 + e^{-\beta(E+V)} + e^{-\beta(E-V)}} \\
 &= \int_0^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \frac{e^{-\beta(E-V)}}{1 + e^{-\beta(E-V)}}.
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Die Summanden w_+ können, da sie einen positiven Beitrag aus der Unordnungswechselwirkung haben, bei tiefen Temperaturen allgemein vernachlässigt werden. Für $T = 0$ gilt insbesondere

$$\frac{e^{-\beta(E-V)}}{1 + e^{-\beta(E-V)}} = \begin{cases} 0 & \text{falls } E - V > 0 \\ 1 & \text{falls } E - V < 0 \end{cases} \tag{3.40}$$

Somit hat man für große r ($\ln r \gg \bar{\sigma}$ und $\ln r \gg E_C/J$)

$$\begin{aligned}
 p(r, \theta) &= \int_E^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \\
 &\approx \sqrt{\frac{\bar{\sigma}}{\ln r - \cos^2 \theta}} r^{-\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}}} e^{\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}} \cos^2 \theta},
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

wie in (2.73) aus Abschnitt 2.4 bereits hergeleitet worden ist. Da wir Flußgleichungen aber nicht nur bei $T = 0$ berechnen möchten, ist eine Untersuchung auch bei höheren Temperaturen notwendig.

3.2.2 Wahrscheinlichkeit bei $T < T^*$

Für $T > 0$ gilt (3.40) nicht. Hier liefert auch der Fall $E - V > 0$ einen Beitrag zur Integration

$$\begin{aligned}
 p(r, \theta) &= \int_0^E \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} e^{-\beta(E-V)} + \int_E^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \\
 &= \tilde{p}(r, \theta) + p_{T=0}(r, \theta),
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

der zu berechnen ist. Mittels Substitution erhält man für diesen Anteil

$$\tilde{p}(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta E + \frac{1}{2}\beta^2 \Delta^2} \int_{\frac{\beta\Delta^2 - E}{\sqrt{2}\Delta}}^{\frac{\beta\Delta}{\sqrt{2}}} e^{-t^2} dt. \tag{3.43}$$

Allgemein erfüllt im Falle großer Werte x die Funktion $\Phi(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ die Relation

$$1 - \Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x} e^{-x^2} \left(1 - \frac{1}{2x^2} + \dots \right), \tag{3.44}$$

die sich im Fall $T < T^*$ anwenden läßt, da β hinreichend groß ist:

$$\begin{aligned}\tilde{p}(r, \theta) &= \frac{1}{2} \left[\Phi \left(\frac{\beta \Delta}{\sqrt{2}} \right) - \Phi \left(\frac{\beta \Delta^2 - E}{\sqrt{2} \Delta} \right) \right] e^{\frac{1}{2} \beta^2 \Delta^2 - \beta E} \\ &\approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{2} \Delta}{\beta \Delta^2 - E} e^{-\frac{E^2}{2\Delta^2}} - \frac{\sqrt{2} \Delta}{\beta \Delta^2} e^{-\beta E} \right] \\ &= \frac{E}{\beta \Delta^2 - E} p_{T=0}(r, \theta),\end{aligned}\tag{3.45}$$

dabei wird der zweite Term der zweiten Zeile aufgrund der niedrigen Temperatur vernachlässigt. Mit (3.41) ergibt sich für

$$\begin{aligned}p(r, \theta) &= \frac{\beta \Delta^2}{\beta \Delta^2 - E} p_{T=0}(r, \theta) \\ &\propto r^{-\frac{1}{4\pi\sigma}} e^{\frac{1}{4\pi\sigma} \cos^2 \theta}.\end{aligned}\tag{3.46}$$

Diese Formel ist offenbar eine Verallgemeinerung der Aussage für $T = 0$. Es zeigt sich, daß im gesamten neu zu betrachtenden Bereich $T < T^*$ die für verschwindende Temperatur gefundenen Abhängigkeiten dominieren. Die Dipolwahrscheinlichkeit $P(r)$ ist in diesem Bereich somit

$$\begin{aligned}P(r) &\propto 2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} r^{-\frac{1}{4\pi\sigma}} e^{\frac{1}{4\pi\sigma} \cos^2 \theta} \\ &\propto 2r^{-\frac{1}{4\pi\sigma}} e^{\frac{1}{8\pi\sigma}} I_0 \left(\frac{1}{8\pi\sigma} \right),\end{aligned}\tag{3.47}$$

denn es gilt $e^{x \cos^2 \theta} = e^{\frac{x}{2}} e^{\frac{x}{2} \cos 2\theta}$, und die modifizierte Besselfunktion ist durch $I_0(x) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{x \cos 2\theta}$ definiert.

3.2.3 Wahrscheinlichkeit bei $T \geq T^*$

Analog zum obigen Fall gilt auch im hohen Temperaturbereich (3.43). Hier strebt allerdings $\frac{\beta \Delta}{\sqrt{2}} \rightarrow 0$, während die untere Integrationsgrenze für große Längenskalen unbeschränkt ins Negative wächst. Wegen $\int_{-\infty}^0 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ gilt im diesem Fall

$$\tilde{p}(r, \theta) \propto e^{\frac{1}{2} \beta^2 \Delta^2 - \beta E}.\tag{3.48}$$

Da dieser Term den Beitrag von $p_{T=0}$ bei hohen Temperaturen überwiegt, kann letzterer vernachlässigt werden. Setzt man die bekannten Werte für E und Δ (aus (2.70)) ein, so resultiert abschließend für $p(r, \theta)$

$$p(r, \theta) \propto \begin{cases} r^{-\frac{1}{4\pi\sigma}} e^{\frac{1}{4\pi\sigma} \cos^2 \theta} & \text{für } T < T^* \\ r^{-\frac{J}{4\pi T} (1 - \frac{J\bar{\sigma}}{4T})} e^{\frac{J}{4\pi T} (1 - \frac{J\bar{\sigma}}{4T}) \cos^2 \theta} & \text{für } T \geq T^* \end{cases}\tag{3.49}$$

3.3. POLARISIERBARKEIT

wobei die Bedingungen $\ln r \gg \bar{\sigma}$ und $\ln r \gg \frac{E_C}{J}$ erfüllt sein müssen.

Für die winkelmittelte Wahrscheinlichkeit $P(r)$ einen Dipol mit Separation r zu finden, erhält man daher

$$P(r) \propto \begin{cases} 2r^{-\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}}} e^{\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}} I_0\left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}\right) & \text{für } T < T^* \\ 2r^{-\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T})} e^{\frac{J}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T})} I_0\left(\frac{J}{8\pi T}\left(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T}\right)\right) & \text{für } T \geq T^* \end{cases} \quad (3.50)$$

Beide Proportionalitäten der Wahrscheinlichkeitsdichte liefern für $T = T^* = \frac{J\bar{\sigma}}{2}$ dasselbe Resultat, sie sind somit konsistent. Durch den Ansatz (3.32) für eine *normierte* Wahrscheinlichkeit ergibt sich bei hohen Temperaturen zwar eine Boltzmann-verteilte Wahrscheinlichkeit, die [2] im gesamten Temperaturbereich angesetzt hat. Bei niedrigen Temperaturen $T < T^*$, wo die Boltzmann-Verteilung zu Widersprüchen in Nelsons Arbeit führt, liefert obiger Ansatz eine *Fermi-verteilte* Wahrscheinlichkeit. Aufgrund der Berücksichtigung des fermionischen Charakters der Versetzungsdipole treten bei tiefen Temperaturen nun im Rahmen des Gültigkeitsbereichs obiger Formeln keine sehr großen Dipolwahrscheinlichkeiten $P(r) \gg 1$ mehr auf. Daher ist es gerechtfertigt im folgenden dielektrischen Formalismus die Versetzungspaare als *nicht-wechselwirkende Fermionen* zu behandeln.

3.3 Polarisierbarkeit

Mit obiger Wahrscheinlichkeitsdichte ist es möglich, die elektrische Suszeptibilität zu berechnen. Dazu wird der *Dipoltensor* $Q_{ij}(r, \theta)$ eines Dipols mit Abstand r und Winkel θ benötigt, der nach (3.21) die Form

$$\begin{aligned} Q_{ij}(r, \theta) &= \frac{1}{2} \int d^2r \, \eta_{r,\theta}(\mathbf{r}) x_i x_j \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ik} \epsilon_{jl} (b_k \epsilon_{lm} x_m + b_l \epsilon_{km} x_m) \end{aligned} \quad (3.51)$$

annimmt. Hierbei ist $\eta_{r,\theta}(\mathbf{r})$ die Quellenfunktion des Dipols. Die Wechselwirkung dieses Dipols mit einem von außen angelegten homogenen Feld entspricht formal der Quadrupolwechselwirkung der zweidimensionalen Elektrodynamik, wobei aufgrund der Definition von Q_{ij} kein Vorfaktor auftritt. Diese Wechselwirkung ist

$$W = \sum_{ij} Q_{ij} E_{ij}. \quad (3.52)$$

Der Tensor E_{ij} symbolisiert die zweifache Ableitung der Verzerrungsfunktion $E_{ij} := \nabla_i \nabla_j \chi$. Die Verzerrung, die χ darstellt, wird durch eine von außen an das System angelegte Konfiguration hervorgerufen. Analog zu Elektrodynamik, wo man Konfigurationen betrachtet, die zu einem homogenen, konstanten E-Feld führen, sollen die Konfigurationen hier so gewählt sein, daß der Tensor E_{ij} konstant ist.

Auch hier genügt es, sich bei der Untersuchung auf den Fall mit zwei erlaubten Burgers-Vektorrichtungen zu beschränken, da die hier untersuchte Polarisierbarkeitsdichte und damit die Suszeptibilität durch die Einführung zusätzlicher Ausrichtungen nicht abnehmen darf. Es gilt somit eine zu (3.37) analoge Relation für diese Größen.

Die *Polarisationsdichte* $q_{ij}(r, \theta)$ für einen Versetzungsdipol mit Burgers-Vektor \mathbf{b} bei \mathbf{r}_α und mit $-\mathbf{b}$ bei \mathbf{r}_β ist somit

$$q_{ij}(r, \theta) = \left[\frac{w_+ - w_-}{1 + w_+ + w_-} Q_{ij}(r, \theta) \right]_D, \quad (3.53)$$

mit

$$w_\pm = \exp[-\beta(E \pm V \pm W)]. \quad (3.54)$$

Mittels dieser Polarisationsdichte läßt sich formal eine Größe A_{ijkl} definieren, aus deren Komponenten dann mit (3.24) die Polarisierbarkeitsdichte der Versetzungspaare bei Abstand r ermittelt werden kann.

$$A_{ijkl}(r) := 2 \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left[\frac{\partial q_{ij}(r, \theta)}{\partial E_{kl}} \right]_D \Big|_{E=0} \quad (3.55)$$

Diese Definition entspricht dem Vorgehen in der Elektrodynamik, wo ein ebenso angesetzter Tensor die Berechnung der Polarisierbarkeit erlaubt. Diese Analogie wird ausführlich in Anhang C.1 gezeigt.

Der Vorfaktor $\frac{1}{2}$ ist notwendig aufgrund der Tatsache, daß in (3.53) eine Orientierung nur modulo 180 Grad ausgezeichnet ist, der Faktor 2, da es auf dem Quadratgitter neben den beiden in (3.53) berücksichtigten Burgers-Vektor - Orientierungen mit Winkel θ noch zwei weitere mit Winkel $\theta + \frac{\pi}{2}$ gibt, die denselben Beitrag zur Polarisationsdichte liefern.

3.3.1 Polarisierbarkeit ohne Unordnung

Zunächst werten wir (3.55) für den Fall ohne Unordnung aus. Hier erhält man nach der Ableitung

$$\begin{aligned} A_{ijkl}(r) &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left[\frac{\beta Q_{ij} Q_{kl} [(w_+ + w_-)(1 + w_+ + w_-) - (w_+ - w_-)^2]}{(1 + w_+ + w_-)^2} \right] \Big|_{E=0} \\ &= - \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \beta Q_{ij} Q_{kl} \left[\frac{w_+ + w_-}{1 + w_+ + w_-} \right] \Big|_{E=0} \\ &= - \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \beta Q_{ij} Q_{kl} 2p(r, \theta), \end{aligned} \quad (3.56)$$

dabei wurde benutzt, daß ohne Unordnung und ohne äußeres Feld $w_+ - w_- = 0$ gilt. Wie in Anhang C.2 hergeleitet wird, gilt folgende nützliche Relation

3.3. POLARISIERBARKEIT

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} Q_{ij} Q_{kl} e^{x \cos^2 \theta} \\
&= \frac{1}{4} \epsilon_{ir} \epsilon_{js} \epsilon_{kt} \epsilon_{lu} e^{\frac{x}{2}} [Q_1(r)(\delta_{rt} \delta_{su} + \delta_{ru} \delta_{ts}) + Q_2(r) \delta_{rs} \delta_{tu}],
\end{aligned} \tag{3.57}$$

wobei

$$\begin{aligned}
Q_1(r) &= \frac{1}{2} r^2 I_0\left(\frac{x}{2}\right) \\
Q_2(r) &= -\frac{1}{2} r^2 I_1\left(\frac{x}{2}\right).
\end{aligned} \tag{3.58}$$

I_0 und I_1 sind modifizierte Besselfunktionen, deren Definition durch

$$\begin{aligned}
I_0(x) &:= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{x \cos 2\theta} \\
I_1(x) &:= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos 2\theta e^{x \cos 2\theta}
\end{aligned} \tag{3.59}$$

gegeben ist. Definiert man nun die Größen $A_1(r)$ und $A_2(r)$ wie folgt

$$C_i(r) = \int_0^r d^2 r' A_i(r') \quad \text{mit } i = (1, 2), \tag{3.60}$$

so resultiert aufgrund von (3.24) und der speziellen Form der Dipol-Wahrscheinlichkeit ohne Unordnung ($p(r, \theta) = r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{4\pi T} \cos^2 \theta}$), die die Benutzung von (3.57) ermöglicht:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} A_1(r) &= A_{xyxy}(r) = A_{xyyx}(r) = A_{yxyx}(r) = A_{yxxy}(r) \\
&= -\frac{2}{T} \frac{1}{4} r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{8\pi T}} \frac{r^2}{2} I_0\left(\frac{J}{8\pi T}\right) \\
2A_2(r) &= A_{xxxx}(r) + A_{xxyy}(r) - A_1(r) = \dots \\
&= -\frac{r^{-\frac{J}{4\pi T}}}{2T} e^{\frac{J}{8\pi T}} r^2 \left(I_0\left(\frac{J}{8\pi T}\right) - I_1\left(\frac{J}{8\pi T}\right) - I_0\left(\frac{J}{8\pi T}\right) \right) \\
&= \frac{1}{2T} r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{8\pi T}} r^2 I_1\left(\frac{J}{8\pi T}\right).
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Mit Gleichungen (3.26) und (3.27) zeigt sich nun, daß die Polarisierbarkeitsdichte $A(r)$ folgenden Wert annimmt

$$\begin{aligned} A(r) &= -(A_1(r) + A_2(r)) \\ &= \frac{r^2}{2T} r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{8\pi T}} \left(I_0 \left(\frac{J}{8\pi T} \right) - \frac{1}{2} I_1 \left(\frac{J}{8\pi T} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Diese Polarisierbarkeitsdichte stimmt mit den von Kosterlitz und Thouless [9] angegebenen Werten für C_1 und C_2 überein.

Für die *Polarisierbarkeit* $\alpha(r)$ eines Versetzungspaares folgt unter Beachtung der Relation (3.27)

$$\begin{aligned} \alpha(r) &= \frac{A(r)}{2 \frac{1}{2} \int \frac{d\theta}{2\pi} p(r, \theta)} \\ &= \frac{\int d\theta \frac{r^2}{2T} \left(1 - \frac{1}{2} \cos 2\theta \right) r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{4\pi T} \cos^2 \theta}}{\int d\theta r^{-\frac{J}{4\pi T}} e^{\frac{J}{4\pi T} \cos^2 \theta}} \\ &= \frac{r^2}{2T} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \cos 2\theta \rangle_{ang} \right). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Ohne Unordnung ist dieser Wert für die Polarisierbarkeit bereits von Young [13] auf eine etwas andere Weise hergeleitet worden. Das Symbol $\langle \dots \rangle_{ang}$ bedeutet eine Mittelung über die Winkel. Der Wichtungsfaktor ist die Dipolwahrscheinlichkeit und damit vom Temperaturbereich abhängig.

3.3.2 Polarisierbarkeit mit Unordnung

Dieses bis hierher entwickelte Prinzip zur Behandlung der Polarisierbarkeit ohne Unordnung kann durch eine Erweiterung auch auf Fälle mit Unordnung übertragen werden. Hierzu ist eine Unordnungsmittelung in Formel (3.56) notwendig. Der Tensor $A_{ijkl}(r)$ wird modifiziert zu

$$A_{ijkl}(r) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \beta Q_{ij} Q_{kl} \underbrace{\left[\frac{w_+ + w_- + 4w_+ w_-}{(1 + w_+ + w_-)^2} \right]_{E=0}}_{:=\pi(r, \theta)} \Big|_D. \quad (3.64)$$

Es ist also gegenüber dem bisher Berechneten zusätzlich der Ausdruck $\pi(r, \theta)$ auszuwerten. Beschränkt man sich dabei in Zähler und Nenner auf die führenden

3.3. POLARISIERBARKEIT

Terme, so folgt

$$\begin{aligned}\pi(r, \theta) &\approx 2 \int_0^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2}} \frac{e^{-\beta(E-V)}}{1 + e^{-2\beta(E-V)}} \\ &\approx 2 \left[\int_0^E \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2} - \beta(E-V)} + \int_E^\infty \frac{dV}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} e^{-\frac{V^2}{2\Delta^2} + \beta(E-V)} \right].\end{aligned}\quad (3.65)$$

Unter Benutzung der Methoden und Schreibweise aus Abschnitt 3.2.2 läßt sich dies vereinfachen zu

$$\begin{aligned}\pi(r, \theta) &= 2\tilde{p}(r, \theta) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{\beta E + \frac{1}{2}\beta^2 \Delta^2} \int_{\frac{\beta\Delta^2 + E}{\sqrt{2}\Delta}}^\infty e^{-t^2} dt \\ &= 2\tilde{p}(r, \theta) + e^{\beta E + \frac{1}{2}\beta^2 \Delta^2} \left[\Phi\left(\frac{\beta\Delta^2 + E}{\sqrt{2}\Delta}\right) - \Phi(\infty) \right] \\ &= 2\tilde{p}(r, \theta) + 2 \frac{E}{E + \beta\Delta^2} p_{T=0}(r, \theta).\end{aligned}\quad (3.66)$$

Im hohen Temperaturbereich $T > T^*$ gilt $\tilde{p} \gg p_{T=0}$, daher kann man den zweiten Term in (3.66) vernachlässigen. Ein identisches Vorgehen wie im vorherigen Abschnitt ist möglich, da auch hier die Form von \tilde{p} die Anwendung von (3.57) erlaubt. Wir erhalten für die Polarisierbarkeitsdichte und die Polarisierbarkeit

$$A(r) = \frac{r^2}{2T} r^{-\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{16\pi T^2}} e^{\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}} \left[I_0\left(\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}\right) - \frac{1}{2} I_1\left(\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}\right) \right] \quad (3.67)$$

$$\alpha(r) = \frac{r^2}{2T} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \cos 2\theta \rangle_{ang} \right). \quad (3.68)$$

Für Temperaturen unterhalb der Grenze T^* gibt Relation (3.46)

$$\begin{aligned}\pi(r, \theta) &= 2 \left(\frac{E}{\beta\Delta^2 - E} + \frac{E}{E + \beta\Delta^2} \right) p_{T=0}(r, \theta) \\ &\approx 2 \frac{T}{T + T^*} p_{T=0}(r, \theta).\end{aligned}\quad (3.69)$$

Nach Anwendung des bekannten Verfahrens findet man auch hier die gesuchten Größen.

Insgesamt ergibt sich so für die Polarisierbarkeitsdichte $A(r)$:

$$A(r) = \begin{cases} \frac{r^2}{T+T^*} r^{-\frac{1}{4\pi\bar{\sigma}}} e^{\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}} \left[I_0\left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}\right) - \frac{1}{2} I_1\left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}\right) \right] & \text{für } T < T^* \\ \frac{r^2}{2T} r^{-\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{16\pi T^2}} e^{\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}} \left[I_0\left(\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}\right) - \frac{1}{2} I_1\left(\frac{4TJ - J\bar{\sigma}}{32\pi T^2}\right) \right] & \text{für } T \geq T^* \end{cases} \quad (3.70)$$

Analog ist die Polarisierbarkeit

$$\alpha(r) = \begin{cases} \frac{r^2}{T+T^*} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \cos 2\theta \rangle_{ang<}\right) & \text{für } T < T^* \\ \frac{r^2}{2T} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \cos 2\theta \rangle_{ang>}\right) & \text{für } T \geq T^* \end{cases} \quad (3.71)$$

Die Notationen der Winkelmittelung sollen den Unterschied der zu benutzenden Gewichte verdeutlichen. Es sind

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_{ang<} &: e^{\frac{1}{4\pi\sigma} \cos^2 \theta} \\ \langle \dots \rangle_{ang>} &: e^{\frac{J}{4\pi T} (1 - \frac{J\bar{\sigma}}{4T}) \cos^2 \theta} . \end{aligned} \quad (3.72)$$

Diese Resultate sind konsistent bei $T = T^*$. Die angestrebten Flußgleichungen bei Renormierung können jetzt hergeleitet werden, indem man die gewonnenen Ergebnisse in (3.26) einsetzt und (3.2) beachtet. Das nächste Kapitel wird diese Flußgleichungen und ihre physikalischen Konsequenzen behandeln.

3.3. POLARISIERBARKEIT

Kapitel 4

Flußgleichungen und Phasendiagramme

4.1 Ergebnisse für das Quadratgitter

In Kapitel 3 sind alle notwendigen Relationen hergeleitet worden, um das Schmelzen kristalliner Filme mit quadratischem Gitter zu analysieren. Das Skalenverhalten der dielektrischen Konstante und damit der Kopplungskonstante bei Renormierung kann aus den Ergebnissen gewonnen werden. Dieses Skalenverhalten läßt direkte Schlüsse auf das gesuchte Phasendiagramm zu, welches die feste Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung bezüglich Translation von einer nicht-kristallinen Phase trennt, die diese Ordnung nicht zeigt.

4.1.1 Herleitung der Flußgleichungen

Zunächst ist durch (3.26) der Wert der renormierten dielektrischen Konstanten in Abhängigkeit der Längenskala gegeben. Mit der Beziehung zwischen Suszeptibilität zur Polarisierbarkeitsdichte aus (3.60) gilt daher

$$\varepsilon(r + dr) = \varepsilon(r) + 4\pi A(r) 2\pi r dr. \quad (4.1)$$

Nun ist es möglich die Änderung der Kopplungskonstanten $J(r)$ zu ermitteln, die resultiert, wenn man bei der Renormierung von einer Längenskala r zu einer Skala $r+dr$ übergeht, das heißt den Abschirmeffekt derjenigen Versetzungspaaren zu berücksichtigen, deren Separation zwischen r und $r + dr$ liegt. (3.2) gibt mit Hilfe einer Entwicklung

$$J(r + dr) = \frac{4\pi}{\varepsilon(r + dr)} = \frac{4\pi}{\varepsilon(r) + 8\pi^2 A(r) r dr} \quad (4.2)$$

$$\approx J(r) - J(r)^2 A(r) 2\pi r dr + O(A^2).$$

4.1. ERGEBNISSE FÜR DAS QUADRATGITTER

Hieraus folgt sofort die Flußgleichung der Kopplungskonstanten. Setzt man $l := \ln r$, so ist

$$\frac{dJ}{dl} = r \frac{dJ}{dr} = -J(r)^2 A(r) 2\pi r^2 + O(A^2). \quad (4.3)$$

Wir führen nun den bereits in Kapitel 2 behandelten Begriff der *Fugazität* y ein. Wegen (2.71) ist der Ausgangswert dieser Fugazität im nicht-renormierten System mit $r = 1$ gegeben durch

$$y_0 = e^{-\frac{E_C}{T}} = e^{-\frac{(\tilde{C}+1)J}{8\pi T}}, \quad (4.4)$$

die Konstante \tilde{C} beträgt nach Anhang A etwa $\frac{\pi}{2}$. In renormierten Systemen wird die Fugazität als $y = e^{-F_C/T}$ aufgefaßt, wobei F_C die freie Energie eines Versetzungskerns auf der entsprechenden Skala r ist. Da die Zahl der durch Renormierung verlorengegangenen möglichen Dipolplätze pro Platzpaar $\propto r^4$ skaliert und die Wahrscheinlichkeit einen Versetzungsdipol zu finden $p(r, \theta)$ beträgt, ergibt sich für die renormierte Fugazität

$$y(r)^2 = \langle r^4 p(r, \theta) \rangle. \quad (4.5)$$

Hierbei bezeichnet $\langle \dots \rangle$ eine näher zu bestimmende Art der Winkelmittelung. Berücksichtigt man für hohe Temperaturen $T > T^*$, den bisher vernachlässigten Beitrag der Energie der Versetzungskerne E_C zur Dipolwahrscheinlichkeit, so modifiziert sich (3.49) zu

$$p(r, \theta) \propto r^{-\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T})} e^{\frac{J}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T})} \cos^2 \theta e^{-\frac{2E_C}{T}}. \quad (4.6)$$

Dies zeigt, daß (4.5) für kleine r der Forderung $y_0 = e^{-E_C/T}$ nur dann genügen kann, wenn die Winkelmittelung die bereits für die Polarisierbarkeit (vgl. (3.72)) benutzte Form hat:

$$y(r)^2 = \langle r^4 p(r, \theta) \rangle_{ang}. \quad (4.7)$$

Diese Definition der renormierten Fugazität stimmt mit den von Nelson, Halperin und Young genutzten Ansätzen [2, 13, 14] überein. Für tiefe Temperaturen $T < T^*$ findet man $y_0 = e^{-E_C/T}$ allerdings nicht, wenn man die Dipolwahrscheinlichkeit entsprechend (3.49) ansetzt, welche aber auch nur für große Werte von r korrekt ist. Eine genauere Untersuchung für kleine Längenskalen gibt auch hier das richtige Ergebnis.

Schließlich bleibt noch zu bemerken, daß mittels dieser Definition die Fugazität im relevanten Bereich $\bar{\sigma} < \sigma$ und $T < T^*$ klein bleibt. Hier gilt auf großen Skalen $|y| \ll 1$. Wir führen jetzt noch eine nützliche Variable τ^* ein, die im folgenden die expliziten Fallunterscheidungen zwischen hohem und niedrigem Temperaturbereich überflüssig macht

$$\tau^* = \min\left(1, \frac{2T}{J\bar{\sigma}}\right) \quad (4.8)$$

Somit nimmt τ^* im Bereich $T > T^*$ den Wert 1 an, im Bereich $T < T^*$ den Wert $\tau^* = \frac{T}{T^*}$. Insbesondere ist diese Definition konsistent bei $T = T^*$. Für die renormierte Fugazität erhält man hiermit auf großen Skalen

$$y(l)^2 = r^4 r^{-\frac{J\tau^*}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} \Big|_{r=e^l}. \quad (4.9)$$

Die hier sowie im folgenden auftretenden Größen sind immer renormiert. Mit dieser Fugazität und (4.3) ergeben sich die gesuchten Renormierungs-Flußgleichungen für das quadratische zweidimensionale Gitter:

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{dl} = & - \frac{2\pi J^2}{T + T(\tau^*)^{-1}} y^2 \exp\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) \\ & \times \left[I_0\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) - \frac{1}{2} I_1\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) y \quad (4.11)$$

$$\frac{d\bar{\sigma}}{dl} = 0 \quad (4.12)$$

Bei diesen Flußgleichungen wurden lediglich die ersten beiden Ordnungen in y berücksichtigt, was aufgrund obiger Ausführungen gerechtfertigt ist. Eine Renormierung der Unordnungsstärke kann mit dem angewandten Formalismus nicht gefunden werden. Die von Tang[5] und Scheidl[6] gefundene Unordnungsrenormierung am XY-Modell müsste bei Verwendung der von ihnen genutzten Formalismen auch bei diesem Problem auftreten.

Die Flußgleichungen stimmen für Systeme ohne Unordnung mit den Ergebnissen von Nelson, Halperin und Young überein [13, 14]. Den Fall mit Unordnung hat Nelson [2] lediglich am Dreiecksgitter untersucht, aber eine Anwendung der dort benutzten Methodik auf das Quadratgitter gäbe eine Übereinstimmung im gesamten Bereich $T > T^*$. Bei tiefen Temperaturen würde sich mit Nelsons Methodik auch für das Quadratgitter ein Wiedereintritt in die nicht-kristalline Phase ergeben, den unsere Gleichungen nicht aufweisen.

4.1.2 Fluß und Phasendiagramm

Wertet man die Flußgleichung der Fugazität, so ist folgendes Verhalten offensichtlich

$$\frac{dy}{dl} \begin{cases} < 0 & \text{falls } T < T^* \text{ und } \bar{\sigma} < \frac{1}{16\pi} \\ & \text{oder } T \geq T^* \text{ und } \bar{\sigma} < \frac{4T}{J} - \frac{64\pi T^2}{J^2} \\ > 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.13)$$

Wie bereits in Abschnitt 2.3.1 erläutert, kann in einem Bereich, in dem y auf großen Skalen immer weiter ansteigt, keine geordnete Phase vorliegen. Aufgrund der Proportionalität zwischen y^2 und der Dipolwahrscheinlichkeit, wird diese dann für $r \rightarrow \infty$ sehr groß, was gleichbedeutend mit der Existenz freier Versetzungen ist. Eine Bedingung für die feste Phase ist also $\frac{dy}{dl} < 0$ auf großen Längenskalen.

Möchte man den durch (4.10) bis (4.12) erzeugten Fluß analog zu Abbildung 2.3 veranschaulichen, so ist es zunächst notwendig

$$\frac{dy}{dK^{-1}} = \frac{dy}{dl} \frac{dl}{dJ} \frac{dJ}{dK} (-K^2) \quad (4.14)$$

4.1. ERGEBNISSE FÜR DAS QUADRATGITTER

mit $K := \frac{J}{T}$ zu berechnen. Im Bereich $K^{-1} > \frac{\bar{\sigma}}{2}$ ist keine Veränderung des von Nelson gewonnen Flußbildes (vgl. Abbildung 2.3) zu erwarten, da die Flußgleichungen im Bereich hoher Temperatur unverändert sind. Interessant hingegen ist das Verhalten im tiefen Temperaturbereich.

Numerische Integration von (4.14) liefert für einen festen Wert von $\bar{\sigma}$ den in Abbildung 4.1 dargestellten Renormierungsfluß.

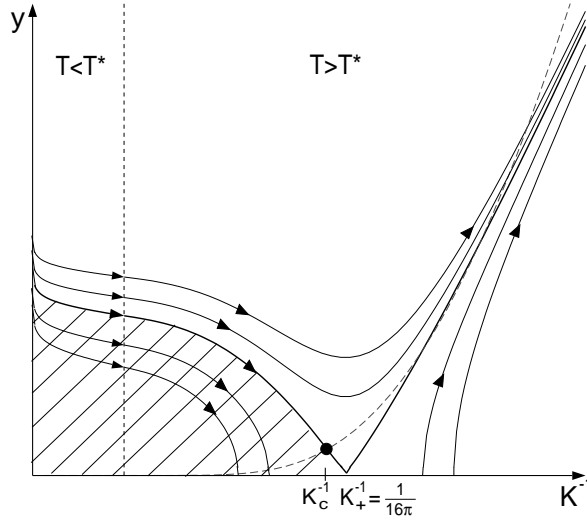


Abbildung 4.1: Renormierungsfluß des Quadratgitters bei $\bar{\sigma} = \frac{1}{32\pi}$

Der Startpunkt des Flusses befindet sich immer auf der gestrichelten Linie y_0 . Die dick eingezeichnete Linie ist die Separatrix, die einen schraffierten Bereich abtrennt. Sie mündet bei K_+^{-1} in die Linie $y = 0$. Der Schnittpunkt der Separatrix mit der Linie y_0 liefert einen Wert K_c^{-1} . Für Anfangswerte mit $K^{-1} < K_c^{-1}$, also bei genügend tiefer Temperatur, liegt der Startpunkt im schraffierten Bereich, wo der Fluß immer bei $y = 0$ und einem endlichen Wert von K endet. Hier befindet man sich somit in der festen Phase. Liegt der Startpunkt außerhalb des schraffierten Bereichs, wächst die Fugazität immer stärker an, man befindet sich in der nicht-kristallinen Phase.

Somit ist $T_c(\bar{\sigma}) = K_c^{-1}J$, die reale Phasenübergangs-Temperatur, sie fällt für $E_C \rightarrow \infty$ mit T_+ zusammen. Analysiert man für alle Werte von $\bar{\sigma}$ den Renormierungsfluß, so ergibt sich das Phasendiagramm für das System, dargestellt in Abbildung 4.2.

Die durchgezogene Linie stellt die renormierte Phasengrenze $T_+(\bar{\sigma})$ dar, während die reale Phasengrenze $T_c(\bar{\sigma})$ durch die gestrichelte Linie wiedergegeben ist. Im Gegensatz zum Phasendiagramm von Nelson (dün gestrichelte Linie) findet man hier keinen Wiedereintritt in die ungeordnete Phase. Daher steht dieses Ergebnis auch nicht im Widerspruch zu der Arbeit von Ozeki und Nishimori [20].

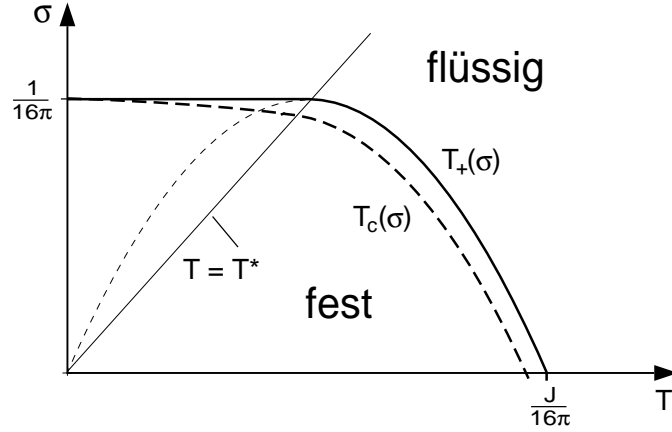


Abbildung 4.2: Phasendiagramm für das Quadratgitter. Es zeigt die Abhängigkeit zwischen kritischer Temperatur und Unordnungstärke

4.2 Ergebnisse für das Dreiecksgitter

Der wesentliche Unterschied zwischen Quadrat- und Dreiecksgitter, der dazu führt, daß die Ergebnisse des Quadratgitters nicht einfach auf das Dreiecksgitter übertragbar sind, ist die Tatsache, daß auf dem Dreiecksgitter auch drei Burgers-Vektoren so kombiniert werden können, daß sie in der Summe ladungsneutral sind. Wir werden diesen Unterschied mit Hilfe des von Young [13] benutzten Formalismus behandeln.

4.2.1 Modifikationen für das Dreiecksgitter

Eine solche ladungsneutrale Kombination von drei Burgers-Vektoren, im folgenden auch Tripol genannt, zeigt Abbildung 4.3. Der Abstand r' sei der kleinste Abstand zweier Burgers-Vektoren. Überschreitet die Renormierung nun die Länge r' , so werden die Vektoren 1 und 2 zu *einem* Burgers-Vektor zusammengefaßt. Auf größeren Längenskalen liegt somit effektiv ein Dipol vor. Tripole können daher in die Berechnung einbezogen werden, in dem man erlaubt, daß *einer* der beiden Burgers-Vektoren jedes Versetzungspaares mit Separation r aus zwei Burgers-Vektoren mit einem Abstand $r' < r$ zusammengesetzt ist.

Offenbar ändert sich hiermit die Dipolwahrscheinlichkeit, was Neuuntersuchungen erforderlich macht.

Zunächst ist es notwendig die elastische Energie ohne Unordnung dieser Konfiguration zu ermitteln. Wie auch für Dipole auf dem Dreiecksgitter, hat ein Tripol bei festen Positionen sechs Orientierungsmöglichkeiten für die Burgers-Vektoren. Abbildung 4.3 zeigt eine davon. Für den Fall $r \gg r'$ findet man aufgrund der

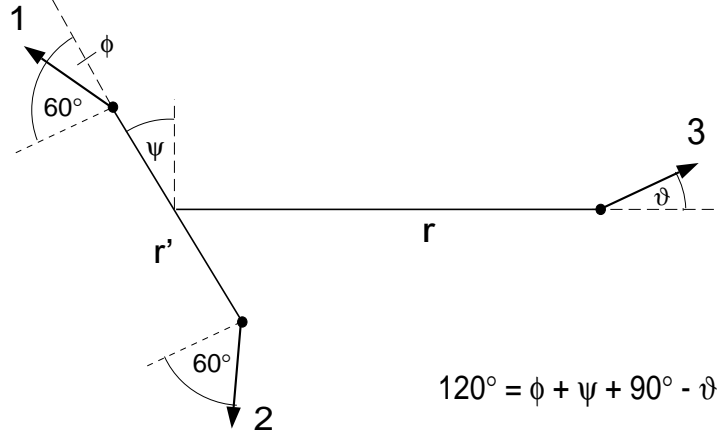


Abbildung 4.3: Darstellung eines Tripols. Faßt man die Vektoren 1 und 2 zusammen, so erhält man effektiv einen Dipol mit Separation r und Winkel θ

Relation (2.45)

$$E_{Tri} = 2 \frac{J}{8\pi} \ln r + \frac{J}{8\pi} \ln r' + 3E_C + \frac{J}{4\pi} \cos \theta \cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{J}{4\pi} \cos \theta \cos\left(\theta - \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{J}{4\pi} \cos \phi \cos\left(\phi + \frac{2\pi}{3}\right). \quad (4.15)$$

Einfache Umformungen mit $\gamma := \psi - \theta$ ergeben

$$\begin{aligned} E_{Tri} &= \frac{J}{4\pi} \ln r + \frac{J}{8\pi} \ln r' + 3E_C - \frac{J}{4\pi} \cos^2 \theta \\ &\quad - \frac{J}{4\pi} \cos^2 \gamma + \frac{J}{16\pi} \\ &= E_{Dip} + \frac{J}{8\pi} \ln r' - \frac{J}{4\pi} \cos^2 \gamma + E_C, \end{aligned} \quad (4.16)$$

wobei E_{Dip} die bereits in (2.71) angegebene elastische Energie eines Versetzungsdipols mit Abstand r ist.

Außer der elastischen Energie muß auch die Varianz der Wechselwirkung des Tripols mit der Unordnung berechnet werden. Diese Varianz ist

$$\Delta_{Tri}^2 = [(V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_3))^2]_D \quad (4.17)$$

Bei Berechnung dieses Ausdrucks ist zu berücksichtigen, daß die Burgers-Vektoren hier nicht, wie bei Dipolen antiparallel zueinanderstehen, sondern der Winkel zwischen ihnen jeweils $\frac{2\pi}{3}$ beträgt. Ist $\Delta_{Dip}^2 = \Delta^2(r, \theta)$ die Varianz der Unordnungswechselwirkung eines Dipols entsprechend (2.70), so gilt wegen der Burgers-Vektor-Stellung

$$\Delta_{Tri}^2 = \Delta_{Dip}^2 + [V(\mathbf{r}_1)^2]_D + 2[V(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1)]_D. \quad (4.18)$$

Aufgrund der Berechnungen aus Anhang B erhält man

$$\Delta_{Tri}^2 = \Delta_{Dip}^2 + \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi} \ln r' + \frac{J^2 \bar{\sigma}}{8\pi} \cos \phi \cos(\phi + \frac{2\pi}{3}). \quad (4.19)$$

Formt man dies analog zu (4.16) um, so resultiert abschließend

$$\Delta_{Tri}^2 = \Delta_{Dip}^2 + \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi} \ln r' - \frac{J^2 \bar{\sigma}}{8\pi} \cos^2 \gamma + \frac{J^2 \bar{\sigma}}{32\pi}. \quad (4.20)$$

Die modifizierte Dipolwahrscheinlichkeit setzt sich nun aus dem reinen Dipolanteil und dem Tripolanteil zusammen. Entsprechend (3.49) gilt

$$p(r, \theta) \propto \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_{Dip}^2}{2\Delta_{Dip}^2}\right) + \exp\left(-\frac{E_{Tri}^2}{2\Delta_{Tri}^2}\right) & \text{für } T < T^* \\ \exp\left(\frac{1}{2}\beta\Delta_{Dip}^2 - \beta E_{Dip}\right) + \exp\left(\frac{1}{2}\beta\Delta_{Tri}^2 - \beta E_{Tri}\right) & \text{für } T \geq T^* \end{cases} \quad (4.21)$$

Setzt man alle bekannten Größen ein und benutzt den Parameter τ^* , so ist

$$p(r, \theta) = r^{-\frac{J\tau^*}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} e^{\frac{J\tau^*}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})\cos^2\theta} \left(1 + e^{-\frac{J\tau^*}{16\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} q(r)\right). \quad (4.22)$$

Hierbei gibt $q(r)$ die Zahl der Möglichkeiten an, daß einer der beiden Burgers-Vektoren (daher Faktor 2) des Dipols aus zwei Vektoren kleineren Abstands kombiniert ist:

$$q(r) = 2 \int_0^{2\pi} \int_1^r d\gamma dr' r' r'^{-\frac{J\tau^*}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} e^{\frac{J\tau^*}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})\cos^2\gamma} \quad (4.23)$$

Indem man erlaubt, daß einer der Vektoren, die den schon zusammengesetzten Dipolvektor bilden wiederum aus zwei Vektoren noch geringerer Separation gebildet ist, kann dieser Betrachtung die von Young geforderte Selbstkonsistenz gegeben werden. Diese Art der Einführung von Quadrupolen etc. führt allerdings lediglich zu Korrekturen höherer Ordnung, die im folgenden nicht von Interesse sind und auf die daher verzichtet werden kann.

Soll wie für das Quadratgitter die Relation

$$y(r)^2 = \langle r^4 p(r, \theta) \rangle_{ang} \quad (4.24)$$

gelten, so ist die Fugazität y für das Dreiecksgitter wie folgt zu definieren

$$y(l)^2 = r^4 r^{-\frac{J\tau^*}{4\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} \left(1 + e^{-\frac{J\tau^*}{16\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T})} q(r)\right) \Big|_{r=e^l}. \quad (4.25)$$

Bei Untersuchung kleiner Längenskalen gilt auch bei dieser Definition der geforderte Anfangswert

$$y_0 = e^{-\frac{E_C}{T}}. \quad (4.26)$$

Somit sind effektive Dipolwahrscheinlichkeit und Fugazität dem Dreiecksgitter angepaßt worden. Die modifizierten Flußgleichungen folgen hieraus sofort.

4.2.2 Flußgleichungen für das Dreiecksgitter

Wie schon im Falle des Quadratgitters entwickeln wir auch hier die Flußgleichungen bis zur zweiten Ordnung in y . Mit den Ableitungsregeln ergibt sich für den Renormierungsfluß der Fugazität

$$\frac{dy}{dl} = \frac{r}{2y} \frac{dy^2}{dr}. \quad (4.27)$$

Arbeitet man mit der modifizierten Fugazität, bleibt der Fluß der Kopplungskonstante in den betrachteten Ordnungen formal unverändert. Es erfolgt lediglich die Änderung des Vorfaktors, da in (3.55) der erste Faktor eine 3 statt einer 2 sein muß, befindet man sich doch jetzt auf dem Dreiecksgitter, wo es insgesamt sechs Orientierungsmöglichkeiten für einen Dipol mit festen Positionen gibt. Die Renormierungs-Flußgleichungen für das Dreiecksgitter nehmen somit folgende Form an:

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{dl} = & - \frac{3\pi J^2}{T + T(\tau^*)^{-1}} y^2 \exp\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) \\ & \times \left[I_0\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) - \frac{1}{2} I_1\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dl} = & \left(2 - \frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) y \\ & + 2\pi \exp\left(\frac{J\tau^*}{16\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) I_0\left(\frac{J\tau^*}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}\tau^*}{4T}\right)\right) y^2 \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\frac{d\bar{\sigma}}{dl} = 0 \quad (4.30)$$

Wie bereits erwähnt ist mit dem verwendeten Formalismus keine Renormierung der Unordnungsstärke festzustellen, hierzu gelten die schon für das Quadratgitter gemachten Bemerkungen. Wie schon die Flußgleichungen des Quadratgitters, stimmen die des Dreiecksgitters mit den von Nelson, Halperin und Young gefundenen Gleichungen für Systeme ohne Unordnung überein. Zusätzlich ist die Übereinstimmung mit Nelsons Resultaten für ungeordnete Systeme [2] im Bereich $T > T^*$ zu erwähnen. Ebenso wie im Fall des Quadratgitters aber zeigen obige Flußgleichungen auch für das Dreiecksgitter nicht den von Nelson vorhergesagten Wiedereintritt in die ungeordnete Phase.

4.2.3 Phasendiagramm für das Dreiecksgitter

Aufgrund des zweiten Summanden in der Flußgleichung der Fugazität kann $\frac{dy}{dl}$ hier nicht so einfach abgeschätzt werden wie im Fall des Quadratgitters. Offenbar bleibt (4.13) aber gültig für $y \rightarrow 0$, so daß K_+^{-1} ($K := \frac{J}{T}$) nicht verändert wird und keine Änderung der renormierten Phasengrenze $T_+(\bar{\sigma})$ eintritt.

Dennoch ist es notwendig den Fluß genauer zu untersuchen, so daß er über numerische Intergration $\frac{dy}{dK^{-1}}$ veranschaulicht werden muß. Geht man analog zum Quadratgitter vor, so erhält man den in Abbildung 4.4 dargestellten Renormierungsfluß. Auch hier ergibt sich im Bereich $K^{-1} > \frac{\bar{\sigma}}{2}$ keine Änderung gegenüber Nelsons Ergebnissen.

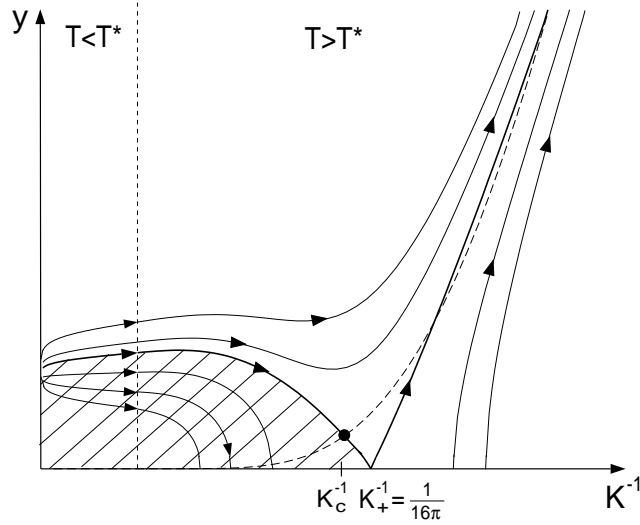


Abbildung 4.4: Renormierungsfluß des Dreiecksgitters bei $\bar{\sigma} = \frac{1}{32\pi}$

Auch hier befindet man sich nur für Startpunkte im schraffierten, durch die dicker eingezeichnete Separatrix abgetrennten Bereich, in der kristallinen festen Phase. Für Startpunkte außerhalb dieses Bereichs endet der Fluß bei beliebig großen Fugazitäten, also in der nicht-kristallinen Phase. Da alle realen Startpunkte auf der gestrichelten Linie y_0 liegen, gibt der Schnittpunkt K_c^{-1} die reale Phasenübergangstemperatur.

Ein auffallender Unterschied zum Renormierungsfluß des Quadratgitters ist, daß der Fluß für $K^{-1} \rightarrow 0$ nicht im Unendlichen, sondern bei einem festen, nur von $\bar{\sigma}$ abhängigen Wert, nämlich bei

$$y(K^{-1} = 0) = \left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}} - 2 \right) e^{-\frac{1}{16\pi\bar{\sigma}}} \frac{1}{2\pi I_0\left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}\right)} \quad (4.31)$$

beginnt. Dies hat keine direkte physikalische Konsequenz, da der Wert für $\bar{\sigma} < \frac{1}{16\pi}$ immer größer als null ist und daher kein Wiedereintritt in die ungeordnete Phase möglich ist. Dennoch stellt sich die Frage, ob dieses Verhalten physikalisch ist, oder nur durch zu grobe Abschätzungen in Abschnitt 4.2.1 hervorgerufen wird.

Analysiert man hier den Renormierungsfluß für alle Werte von $\bar{\sigma}$, so erhält man das in Abbildung 4.5 wiedergegebene Phasendiagramm des Dreiecksgitters.

Wiederum stellt die durchgezogene Linie die renormierte Phasengrenze $T_+(\bar{\sigma})$ dar, die gegenüber dem Quadratgitter unverändert bleibt. Lediglich die reale

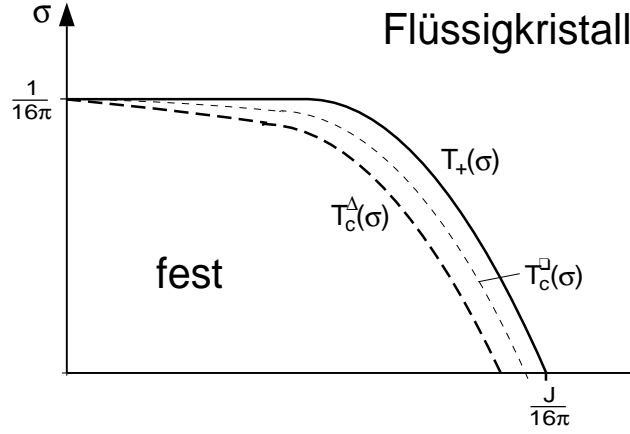


Abbildung 4.5: Phasendiagramm für das Dreiecksgitter. Es zeigt die Abhängigkeit zwischen kritischer Temperatur und Unordnungsstärke

Phasengrenze $T_c^\Delta(\bar{\sigma})$ liegt bei einer tieferen Temperatur als die beim Quadratgitter $T_c^\square(\bar{\sigma})$. Ein wesentlicher Unterschied zwischen den Phasendiagrammen des Quadrat- und des Dreiecksgitters kann also nicht festgestellt werden. In beiden Fällen erfolgt kein Wiedereintritt in die ungeordnete Phase.

4.3 Entropiefluß

Abschließend stellt sich die Frage, ob die gewonnen Ergebnisse zu einem nicht negativen und damit physikalischen Entropiefluß führen. Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 angemerkt, kann der Beitrag zur freien Energiedichte dF_V , den Versetzungsdipole mit einer Größe zwischen r und $r + dr$ leisten, durch

$$dF_V \approx -T r dr \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} d\theta [\ln Z]_D \quad (4.32)$$

angenähert werden. Hierbei ist Z die lokale Zustandssumme, die für das Quadratgitter durch (3.30) gegeben ist. In diesem Fall ist somit

$$dF_V \approx -T r dr \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} d\theta [\ln(1 + w_+ + w_- + \tilde{w}_+ + \tilde{w}_-)]_D, \quad (4.33)$$

da vier mögliche Dipoleinstellungen existieren. Deren elastische Energien E und \tilde{E} (gegeben durch (3.28) und (3.29)) lassen sich nun in abstandsabhängige Anteile E_r und \tilde{E}_r , sowie in winkelabhängige Anteile E_w und \tilde{E}_w aufteilen, so daß $E = E_r + E_w$ und $\tilde{E} = \tilde{E}_r + \tilde{E}_w$ gilt. Auf genügend großen Längenskalen $\ln r \gg \frac{E_C}{J}$ erhält man so

$$E_r = \tilde{E}_r = \frac{J}{4\pi} \ln r \quad (4.34)$$

und

$$E_w = -\frac{J}{4\pi} \cos^2 \theta, \quad \tilde{E}_w = -\frac{J}{4\pi} \sin^2 \theta. \quad (4.35)$$

Ableiten von (4.33) nach $e^{-\beta E_r}$ liefert

$$e^{-\beta E_r} \frac{\partial(dF_V)}{\partial(e^{-\beta E_r})} = -T r dr \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} d\theta \left[\frac{w_+ + w_- + \tilde{w}_+ + \tilde{w}_-}{1 + w_+ + w_- + \tilde{w}_+ + \tilde{w}_-} \right]_D. \quad (4.36)$$

Mit den Berechnungen aus Abschnitt 3.2 erhält man sofort

$$e^{-\beta E_r} \frac{\partial(dF_V)}{\partial(e^{-\beta E_r})} = -\frac{\pi}{2} T r dr P(r), \quad (4.37)$$

wobei $P(r)$ die durch (3.50) gegebene winkelmittelte Wahrscheinlichkeit ist, einen Dipol mit Separation r bei vorgegebenen Versetzungspositionen zu finden. Für das Dreiecksgitter gilt diese Relation auch, allerdings ist hier für die Wahrscheinlichkeit $P(r)$ der sich aus (4.22) ergebende Ausdruck einzusetzen.

Im Fall $T \geq T^* = \frac{J\bar{\sigma}}{2}$ folgt daraus

$$dF_V = -\frac{\pi}{2} T r dr P(r), \quad (4.38)$$

da die $P(r)$ hier linear in $e^{-\beta E_r}$ sind. Für den Fluß der freien Energiedichte ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{dF_V}{dl} &= -\frac{\pi}{2} T r^2 P(r) \\ &= -\pi T \frac{y^2}{r^2} e^{\frac{J}{8\pi T}(1-\frac{J\bar{\sigma}}{4T})} I_0 \left(\frac{J}{8\pi T} \left(1 - \frac{J\bar{\sigma}}{4T} \right) \right). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Dieses Resultat entspricht, abgesehen von Vorfaktoren, den von Tang [5] und Scheidl [6] gefundenen Ergebnissen für das ungeordnete XY-Modell im Bereich $T > T^*$.

Für die Fugazität y in (4.39) ist der zum jeweiligen Gittertyp passende Ausdruck anzusetzen. Offenbar entspricht Gleichung (4.39) der in Abschnitt 2.3.2 gewonnenen Gleichung (2.59). Dort konnte bereits gezeigt werden, daß der hieraus mittels $\frac{dS_V}{dl} = -\frac{\partial}{\partial T} \frac{dF_V}{dl}$ folgende Fluß der Entropie im Fall $T \geq T^*$ positiv ist. Beim Übertragen der dort benutzten Argumente auf (4.39) ist lediglich $\bar{\sigma}$ durch $\frac{\bar{\sigma}}{4}$ zu ersetzen. Für $T \geq T^*$ liegt somit kein unphysikalisches Verhalten vor.

Der interessantere Fall ist $T < T^*$. Hier wurde der Entropiefluß bei dem von Nelson vorgeschlagenen Verhalten negativ und hier kommen auch die in dieser Arbeit entwickelten Modifikationen zum Tragen. Für das Quadratgitter folgt in diesem Temperaturbereich aus (4.37) unter Benutzung von (3.50)

$$\frac{\partial(dF_V)}{\partial(e^{-\beta E_r})} = -\pi T r dr \frac{1}{e^{-\beta E_r}} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-\frac{(E_r + E_w)^2}{2\Delta^2}}, \quad (4.40)$$

4.3. ENTROPIEFLUSS

wobei wie in Anhang B hergeleitet $\Delta^2 = \frac{J^2 \bar{\sigma}}{8\pi} (\ln r - \cos^2 \theta)$ gilt. Integration liefert als wesentlichen Term auf großen Längenskalen

$$dF_V = -\pi r dr \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\Delta^2}{E_r + E_w} e^{-\frac{(E_r + E_w)^2}{2\Delta^2}}. \quad (4.41)$$

Setzt man hier die expliziten Ausdrücke für E_r , E_w und Δ ein, so findet man auf genügend großen Längenskalen ($\ln r \gg \frac{E_C}{J}$ und $\ln r \gg \bar{\sigma}$)

$$dF_V = -\frac{\pi}{2} T^* r dr P(r), \quad (4.42)$$

und für den Fluß der freien Energiedichte im Bereich $T < T^*$

$$\begin{aligned} \frac{dF_V}{dl} &= -\frac{\pi}{2} T^* r^2 P(r) \\ &= -\pi T^* \frac{y^2}{r^2} e^{\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}}} I_0 \left(\frac{1}{8\pi\bar{\sigma}} \right). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Auch dieses Ergebnis stimmt mit dem von Tang und Scheidl gefundenen Verhalten des ungeordneten XY-Modells bis auf Vorfaktoren überein. Für das Dreiecksgitter ergibt sich bei Verwendung der passenden Wahrscheinlichkeit $P(r)$ und der passenden Fugazität y die gleiche Beziehung.

Zur Berechnung des Entropieflusses mittels $\frac{dS_V}{dl} = -\frac{\partial}{\partial T} \frac{dF_V}{dl}$ beschränken wir uns in (4.43) auf die wesentlichen Faktoren, die das Verhalten auf großen Skalen bestimmen. Wir betrachten daher nur $\frac{dF_V}{dl} \propto -T^* y^2$. Die vernachlässigten Faktoren haben keinen Einfluß auf den Entropiefluß.

Wegen

$$\frac{\partial}{\partial T} (T^* y^2) = 0, \quad (4.44)$$

was sowohl beim Quadrat-, als auch beim Dreiecksgitter gilt, liegt kein Entropiefluß vor. Zwar wurden hierbei die impliziten Temperaturabhängigkeiten vernachlässigt, da allerdings auch

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{d}{dl} (T^* y^2) = 0 + O(y^4) \quad (4.45)$$

für beide Gittertypen gefunden wird, liefern auch diese impliziten Abhängigkeiten (vgl. hierzu auch Abschnitt 2.3.2 und [6]) keinen Entropiefluß für $T < T^*$. Dieses Verhalten, welches Tang [5] ebenso für den Tieftemperaturbereich des ungeordneten XY-Modells findet, erklärt er mit einem Einfrieren der Defektpaare bei $T = T^*$. Festzuhalten bleibt, daß anders als bei Nelson [2] der Entropiefluß im Bereich $T < T^*$ nicht unphysikalisch wird.

Kapitel 5

Einfluß eines Substrats

Bisher haben wir lediglich einen freien zweidimensionalen Film betrachtet. Unter realen Bedingungen liegt ein solcher Film allerdings immer auf einem Substrat auf, mit dem der Film auch wechselwirkt. Die in den vorangegangenen Kapiteln gefundenen Ergebnisse sind in diesem Fall nur dann anwendbar, wenn man die Wechselwirkung mit dem Substrat auf großen Längenskalen vernachlässigen kann, die Ordnung im kristallinen Film also nicht gestört wird.

Für ein glattes Substrat ist dies erfüllt, da die Wechselwirkung zwischen Substrat und kristallinem Film konstant ist. In Experimenten ist ein Film aber meist auf Substrate aufgebracht, die, wie der Film selbst, eine kristalline Struktur aufweisen, und deren Gitterkonstante die gleiche Größenordnung besitzt, wie die Gitterkonstante des Films.

5.1 Kommensurables Substrat

Wir beschränken uns hier auf die Untersuchung einer kommensurablen Situation, bei der das Substrat ein Potential erzeugt, dessen Minima dieselbe Geometrie wie der kristalline Film aufweisen, das heißt im Fall eines kristallinen Films mit Quadratgitter-Struktur sind die Minima ebenso als Quadratgitter angeordnet, und im Fall eines Dreiecksgitters bilden auch die Potentialminima ein Dreiecksgitter. Ist a die Gitterkonstante des kristallinen Films, so gelte für die Gitterkonstante b des aus den Potentialminima gebildeten Gitters

$$b = \frac{a}{n}, \quad (5.1)$$

wobei n eine natürliche Zahl sei. Liegt ein solches Potential vor, ist es möglich alle Gitterbausteine des kristallinen Films in einem Potentialminimum zu plazieren, ferner ist kein Potentialminimum mehrfach besetzt. Es ist wesentlich zwischen der Gitterkonstanten b des aus den Potentialminima gebildeten Gitters und der Gitterkonstanten a_S des Substrats zu unterscheiden, da $b \neq a_S$ gelten kann. Ein Beispiel hierfür zeigt Abbildung 6.2, wo die Potentialminima ein Dreiecksgitter bilden, die das Potential erzeugenden Substratatome können allerdings bei den

5.1. KOMMENSURABLES SUBSTRAT

Potentialmaxima sitzen. In diesem Fall wären sie in einem hexagonalen Gitter mit Gitterkonstanten $a_G = \frac{b}{\sqrt{3}}$ angeordnet.

Für $T = 0$ und $\sigma = 0$ werden daher alle Kristallbausteine in den Potentialminima eingelagert sein und ein maximaler Energiegewinn vorliegen. Erst bei höheren Temperaturen oder stärkerer Unordnung wird es möglich sein, die Wechselwirkung zwischen Substrat und Film auf großen Längenskalen zu vernachlässigen.

Im Fall des Quadratgitters sind die primitiven Gittervektoren des kristallinen Films

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

für die primitiven Vektoren des reziproken Gitters folgt hieraus

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{G}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2\pi}{a} \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Diese Vektoren erfüllen die Relation $\mathbf{b}_i \mathbf{G}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Analog hat man für das Dreiecksgitter

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} \\ a\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

und

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{G}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Nun soll die periodische Wechselwirkungsenergie $V(\mathbf{u})$ eines Kristallbausteins mit dem Substrat in Abhängigkeit der Verschiebung \mathbf{u} aus seiner Gleichgewichtsposition in einem Potentialminimum dargestellt werden. Eine geeignete allgemeine Formulierung, die die oben aufgeführten Bedingungen an das Potential erfüllt, liefert die Darstellung in Form einer Fourierreihe

$$V(\mathbf{u}) = - \sum_{k,l} C_{kl} \exp(i n(k\mathbf{G}_1 + l\mathbf{G}_2)\mathbf{u}). \quad (5.6)$$

Hierbei sind k und l ganze Zahlen. Für den Vorfaktor muß $C_{kl} = C_{-k-l}$ gelten, damit das Potential V reell bleibt, ferner fordern wir $C_{kl} \geq 0$, um Potentialminima garantieren zu können. Setzt man $\mathbf{G}_{kl} = n(k\mathbf{G}_1 + l\mathbf{G}_2)$, so ist \mathbf{G}_{kl} immer ein Vektor des reziproken Gitters. Es ist also

$$V(\mathbf{u}) = - \sum_{k,l} C_{kl} \exp(i \mathbf{G}_{kl}\mathbf{u}), \quad (5.7)$$

die Summation entspricht hierbei einer Summation über alle reziproken Gittervektoren. Zur beispielhaften Darstellung solcher Potentiale beschränken wir uns auf jene Summanden aus (5.7), bei denen \mathbf{G}_{kl} einen minimalen, nicht verschwindenden Betrag besitzt. Wie (5.17) zeigen wird, tragen gerade diese Terme wesentlich zur Hamiltonfunktion bei, Terme mit größeren Beträgen von \mathbf{G}_{kl} können für die Fragestellung dieses Kapitels vernachlässigt werden.

Für das Quadratgitter haben $(\pm \mathbf{G}_{10} = \pm n \mathbf{G}_1)$ und $(\pm \mathbf{G}_{01} = \pm n \mathbf{G}_2)$ minimalen Betrag. Setzen wir mit $C_{10} = C_{01} = v$ ein bezüglich der Rotation um $\frac{\pi}{2}$ symmetrisches Potential an, so resultiert

$$V(\mathbf{u}) = -v [\cos(n \mathbf{G}_1 \mathbf{u}) + \cos(n \mathbf{G}_2 \mathbf{u})] \quad (5.8)$$

$$= -v \left[\cos\left(n \frac{2\pi}{a} u_x\right) + \cos\left(n \frac{2\pi}{a} u_y\right) \right]. \quad (5.9)$$

Dieses Potential wird in Abbildung 5.1 gezeigt.

A separate downloading of this figure is possible.

Abbildung 5.1: *Einfaches Potential einer Wechselwirkung zwischen einem Kristallbaustein und dem Substrat für das Quadratgitter. Dunkle Regionen entsprechen Potentialminima, helle den Potentialmaxima*

Für das Dreiecksgitter lauten die \mathbf{G}_{kl} mit minimalem Betrag $(\pm \mathbf{G}_{10} = \pm n \mathbf{G}_1)$, $(\pm \mathbf{G}_{01} = \pm n \mathbf{G}_2)$ und $(\pm \mathbf{G}_{-11} = \pm n(\mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1))$. Die analoge Darstellung des Potentials (vgl. Abbildung 5.2) ist:

$$V(\mathbf{u}) = -v [\cos(n \mathbf{G}_1 \mathbf{u}) + \cos(n \mathbf{G}_2 \mathbf{u}) + \cos(n(\mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1) \mathbf{u})] \quad (5.10)$$

$$= -v \left[\cos\left(n \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} u_y\right) + \cos\left(n \frac{2\pi}{a} u_x + n \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} u_y\right) + \cos\left(-n \frac{2\pi}{a} u_x + n \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} u_y\right) \right]. \quad (5.11)$$

A separate downloading of this figure is possible.

Abbildung 5.2: *Einfaches Potential einer Wechselwirkung zwischen einem Kristallbaustein und dem Substrat für das Dreiecksgitter. Dunkle Regionen entsprechen Potentialminima, helle den Potentialmaxima*

Im folgenden kehren wir wieder zur allgemeinen Formel (5.7) zurück. Betrachtet man nun nicht nur die Wechselwirkung eines Kristallbausteins mit dem Substrat, sondern die Wechselwirkung aller Bausteine, so ergibt sich in der Kontinuumsform folgender Beitrag zur Hamiltonfunktion

$$H_{Sub} = -v \sum_{kl} \tilde{C}_{kl} \int d^2r \exp(i \mathbf{G}_{kl} \mathbf{u}(\mathbf{r})). \quad (5.12)$$

Hierbei ist $v := \max\{C_{kl}\}$. Die C_{kl} aus (5.7) müssen ein solches Maximum haben, da sonst ein Kristallbaustein durch die Wechselwirkung mit dem Substrat beliebig viel Energie gewinnen könnte, was unphysikalisch ist. Ferner gilt $\tilde{C}_{kl} := \frac{C_{kl}}{v}$, woraus $0 \leq \tilde{C}_{kl} \leq 1$ folgt.

Die Kontinuumsform in (5.12) ist gerechtfertigt, wenn ein kontinuierliches Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ vorliegen kann. Dies ist bei sehr großen Werten von v nicht mehr der Fall. Die starke Bindung der Kristallelemente in den Potentialminima würde dazu führen, daß $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ nur noch diskrete Werte annehmen kann, da jede Kristallelement-Verschiebung \mathbf{u} ein Gittervektor des Potentialminima-Gitters sein müßte.

Eine Bedingung für v läßt sich wie folgt abschätzen. Fügt man einem Kristall, der kommensurabel (mit $n = 1$) auf einem Substrat aufliegt, eine zusätzliche Reihe von Kristallbausteinen hinzu, so lagert sich diese Reihe im Falle sehr großer Werte von v bei einer anderen, bereits in Potentialminima liegenden Reihe an. Diese Minima wären somit doppelt besetzt, während links und rechts davon die normale kommensurable Situation erhalten bliebe. Der Störbereich, den man auch Domänenwand nennt, hätte somit eine Breite von $l_0 = b$. Im Falle kleinerer v hingegen würde sich die Breite der Domänenwand vergrößern. Ein Vergleich der elastischen Energiekosten aufgrund von $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ und des Energiegewinns durch die Wechselwirkung mit dem Substrat zeigt, daß ein Energieminimum bei einer Domänenwandbreite von

$$l_0 \propto b \sqrt{\frac{4\mu(\mu + \lambda)}{(2\mu + \lambda)v}}. \quad (5.13)$$

vorliegt [16]. Da die Bedingung für die Kontinuumsform $l_0 \gg b$ lauten muß, folgt für die Stärke des Potentials $v \ll \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}$.

Der Beitrag von H_{Sub} läßt sich dann als Störung der Hamiltonfunktion auffassen. Störungsrechnung in erster Ordnung liefert

$$H_{Sub} = -v \sum_{kl} \tilde{C}_{kl} \int d^2r [\langle \exp(i\mathbf{G}_{kl}\mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D, \quad (5.14)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ eine thermische Mittelung mit dem ungestörten Hamiltonian und $[\dots]_D$ eine Mittelung über die Unordnung symbolisieren. Da in der kristallinen Phase auf sehr großen Längenskalen die Versetzungen keine Rolle mehr spielen, ist eine Mittelung mit einem rein phononischen Verschiebungsfeld möglich, welches eine Gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung zeigt. Berechnungen von Nelson [2] verwendend (vgl. Anhang D), finden wir

$$[\langle \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D = R^{-\frac{TG^2(3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)}} R^{-\frac{\sigma G^2\Omega_0^2(\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2}}. \quad (5.15)$$

Hierbei sind R die Systemgröße, Ω_0 die in Kapitel 2 erläuterte Änderung der Kristallfilmfläche aufgrund von Verunreinigungen und λ, μ die vollständig renormierten Lamé-Koeffizienten, die zu verwenden sind, da obige Rechnung ja sehr große Längenskalen bedingt. Betrachtet man (5.14), so stellt man fest, daß der Beitrag des Summanden kl mit

$$d - \frac{TG_{kl}^2(3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)} - \frac{\sigma G_{kl}^2\Omega_0^2(\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2} \quad (5.16)$$

skaliert (d ist hier die Dimension). Der elastische Anteil der Hamiltonfunktion skaliert wegen der dort enthaltenen Ableitungen mit $d - 2$. Im vorliegenden zweidimensionalen Fall ($d = 2$) folgt daraus, daß bei großen Systemen der Summand kl somit nur dann wesentlich zur Hamiltonfunktion beiträgt, wenn

$$2 \geq \frac{TG_{kl}^2(3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)} + \frac{\sigma G_{kl}^2\Omega_0^2(\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2}. \quad (5.17)$$

erfüllt ist.

Ist diese Ungleichung für die Summanden mit den kleinsten Beträge von $\mathbf{G}_{\mathbf{k}l}$ verletzt, so gilt sie für keinen Summanden. Daher sind nur diese Summanden für unsere Betrachtung wesentlich (vgl. Bemerkung vorne). Beim Quadratgitter liefern die $\mathbf{G}_{\mathbf{k}l}$ mit den kleinsten Beträgen (\mathbf{G}_{10} und \mathbf{G}_{01}) $G_{10}^2 = G_{01}^2 = n^2 \frac{4\pi^2}{a^2}$, für das Dreiecksgitter gilt analog $G_{10}^2 = G_{01}^2 = G_{-11}^2 = n^2 \frac{16\pi^2}{3a^2}$.

Eine Verletzung der Ungleichung (5.17) für alle Summanden bedeutet, daß die Wechselwirkung mit dem Substrat vernachlässigt werden kann. Die in den vorangehenden Kapiteln untersuchte Theorie des Schmelzens ist dann weiterhin anwendbar. Die Bedingung für die Existenz eines Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs vom kristallinen Zustand mit quasi-langreichweitiger Ordnung in den nicht-kristallinen Zustand lautet im Falle eines unterliegenden kommensurablen Substrats daher:

$$\frac{T(3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)} + \frac{\sigma\Omega_0^2(\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2} > \begin{cases} \frac{2a^2}{4\pi^2 n^2} & \text{für Quadratgitter} \\ \frac{6a^2}{16\pi^2 n^2} & \text{für Dreiecksgitter} \end{cases} \quad (5.18)$$

Dieses Ergebnis wurde für Systeme ohne Unordnung bereits von Pokrovsky und Talapov [29] gefunden.

Kritischer Wert von n

Im folgenden betrachten wir lediglich das Dreiecksgitter, da die benutzte Elastizitätstheorie exakt nur für diese Gitterform gelten und man die analogen Ergebnisse für das Quadratgitter durch Austausch von konstanten Faktoren erhält.

Es ist nun notwendig die Bedingung (5.18) mit der in Abbildung 4.5 dargestellten und durch Formel (4.13) beschriebenen Phasengrenze zu vergleichen. Mit der Kopplungskonstanten

$$J = \frac{4\mu(\mu + \lambda)a^2}{2\mu + \lambda} \quad (5.19)$$

und unter Verwendung von $\bar{\sigma} = \sigma \frac{\Omega_0^2}{a^2}$ wird (5.18) zu

$$\frac{T}{J} \frac{(3\mu + \lambda)(\mu + \lambda)}{(2\mu + \lambda)^2} + \bar{\sigma} \frac{(\mu + \lambda)^2}{4(2\mu + \lambda)^2} > \frac{3}{4\pi n^2}. \quad (5.20)$$

Beachtet man die physikalischen Bedingung, daß der *Schubmodul* μ und der *Kompressionsmodul* $\mu + \lambda$ beide positiv sein müssen [23], so findet man, daß die Größen $\frac{(3\mu + \lambda)(\mu + \lambda)}{(2\mu + \lambda)^2}$ und $\frac{(\mu + \lambda)^2}{(2\mu + \lambda)^2}$ aus (5.20) nur Werte innerhalb des Intervalls $[0, 1]$ annehmen können. Das Maximum 1 wird im Fall $\lambda \gg \mu$ erreicht. Da ein unterer kritischer Wert von n berechnet werden soll, sind diese beiden Werte maximal zu setzen. Somit gilt

$$\frac{T}{J} + \frac{\bar{\sigma}}{4} > \frac{3}{4\pi n^2}. \quad (5.21)$$

Der kritische Wert von $\frac{T}{J}$, bis zu dem die kristalline Phase noch existieren kann ist $\frac{1}{16\pi}$, der entsprechende kritische Wert der Unordnungsstärke ist $\bar{\sigma}_c =$

5.1. KOMMENSURABLES SUBSTRAT

$\frac{1}{16\pi}$. Um die kristalline Phase mit QLRO auch bei unterliegendem Substrat beobachten zu können, muß

$$\frac{1}{16\pi} + \frac{1}{64\pi} > \frac{3}{4\pi n^2}. \quad (5.22)$$

erfüllt sein, was der notwendigen Bedingung $n \geq 4$ entspricht.

Es bleibt noch zu zeigen, daß $n \geq 4$ auch eine hinreichende Bedingung ist, das heißt, daß es im Fall $\lambda \gg \mu$ tatsächlich einen Bereich der geordneten Phase gibt für den (5.18) für $n = 4$ erfüllt ist ($\frac{T}{J} = \frac{1}{16\pi}$ und $\bar{\sigma} = \frac{1}{16\pi}$ sind ja nie gleichzeitig möglich).

Nur im System ohne Unordnung liegt der Phasenübergang beim Maximalwert $\frac{T_m}{J} = \frac{1}{16\pi}$. (5.21) reduziert sich hier zu

$$\frac{T}{J} > \frac{3}{4\pi n^2}. \quad (5.23)$$

Für $n = 4$ ist diese Ungleichung erfüllt, somit ist $n \geq 4$ auch eine hinreichende Bedingung für die Existenz der kristallinen Phase mit QLRO.

Abbildung 5.3 verdeutlicht dieses Ergebnis, indem die Bedingung (5.20) graphisch gezeigt wird. Hierbei wird ein System ohne Unordnung mit $\lambda = 2\mu$ angesetzt. Man sieht deutlich, daß nur für $n \geq 4$ die kristalline Phase mit QRLO existiert.

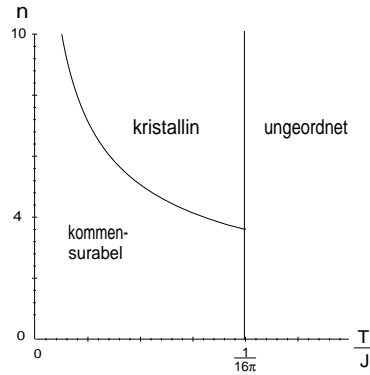


Abbildung 5.1: Beispielhafte graphische Darstellung von (5.20) für $\lambda = 2\mu$ und $\bar{\sigma} = 0$.

Insgesamt ist also festzustellen, daß bei einem unterliegenden kommensurablen Substrat, der beschriebene Kosterlitz-Thouless-Schmelzübergang nur dann gefunden werden kann, wenn die Gitterkonstante des Substrats die Relation $b < \frac{a}{4}$ erfüllt. Ist dies nicht der Fall, fällt die gesamte kristalline Phase mit QLRO weg, da sie in dem Bereich läge, in dem die Wechselwirkung mit dem Substrat auch auf großen Längenskalen wichtig ist. Daher tritt auch der Kosterlitz-Thouless-Übergang von der kristallinen in die hexatische Phase nicht mehr auf. Als kritischen Wert für n haben wir somit

$$n_{krit} = 4 \quad (5.24)$$

Führt man obige Betrachtungen völlig analog für das Quadratgitter durch, so findet man denselben kritischen Wert für n . Das Ergebnis deckt sich mit der qualitativen Aussage von Lyuksyutov, Naumovets und Pokrovsky, daß die kristalline Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung nur für größere Werte von n gefunden werden kann [16]. Ziel des folgenden Abschnitts ist es, bei festem n ein Phasendiagramm für einen kristallinen Film zu finden, der auf einem kommensurablen Substrat aufgebracht ist.

5.2 Phasendiagramm bei unterliegendem Substrat

Sowohl der Schub- als auch der Kompressionsmodul sind positiv. Dies entspricht für die Lamé-Koeffizienten den Bedingungen $\mu > 0$ und $-\mu < \lambda < \infty$. Setzen wir

$$\kappa = \frac{\lambda}{\mu} \quad (5.25)$$

so liegt die Konstante κ im Intervall $[-1, \infty]$. Messungen an realen physikalischen Systemen zeigen, daß die Werte für κ tatsächlich in einem Intervall $[-1, 10]$ zu finden sind.

Möchte man bei festem n den Bereich der geordneten Phase des in Kapitel 4 gewonnen Phasendiagramms abschätzen, der bei unterliegendem Substrat noch beobachtbar ist, so ist es sinnvoll diese Abschätzung in Abhängigkeit der Konstanten κ durchzuführen. Führt man κ in (5.20) für das Dreiecksgitter ein, so erhält man:

$$\frac{T}{J} \frac{(3 + \kappa)(1 + \kappa)}{(2 + \kappa)^2} + \bar{\sigma} \frac{(1 + \kappa)^2}{4(2 + \kappa)^2} > \frac{3}{4\pi n^2}. \quad (5.26)$$

Fügt man dem Phasendiagramm aus Abbildung 4.5 noch eine dritte κ -Achse hinzu, so lassen sich sowohl die Phasengrenze des Kosterlitz-Thouless-Schmelzübergangs, die keine κ -Abhängigkeit zeigt, als auch die Bedingung (5.26) als Flächen in diesem Phasendiagramm darstellen. So kann der Bereich des Phasendiagramms verdeutlicht werden, in dem die Wechselwirkung mit dem Substrat wichtig wird und die in Kapitel 4 erhaltenen Resultate daher nicht mehr zutreffen.

Im folgenden wird das Phasendiagramm für das Dreiecksgitter bei $n = 6$ dargestellt und erläutert.

Abbildung 5.4 zeigt die Abhängigkeit der kritischen Temperatur von κ bei $\bar{\sigma} = 0$. Da, wie bereits erläutert, der Wert für $\frac{T_m}{J}$ des Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs keine κ -Abhängigkeit besitzt, liegt die Phasengrenze zwischen

5.2. PHASENDIAGRAMM BEI UNTERLIEGENDEM SUBSTRAT

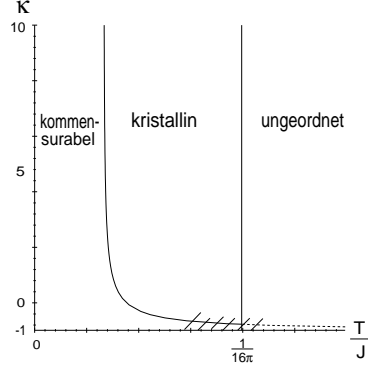


Abbildung 5.2: Phasendiagramm des Dreiecksgitters bei $n = 6$: $\frac{T}{J}$ in Abhängigkeit von κ ohne Unordnung ($\bar{\sigma} = 0$).

flüssiger Phase ohne Translationsordnung und fester kristalliner Phase mit quasi-langreichweitiger Translationsordnung konstant bei $\frac{1}{16\pi}$. Die andere eingezeichnete Kurve separiert den Bereich, in dem (5.18) erfüllt ist, von jenem in dem diese Bedingung nicht gilt. Rechts dieser Kurve (hier gilt (5.18)) spielt die Wechselwirkung mit dem Substrat auf großen Längenskalen somit keine Rolle. Hier existieren die kristalline Phase mit QLRO und der Kosterlitz-Thouless-Übergang zur ungeordneten Phase. Im linken Bereich ist die Wechselwirkung mit dem Potential wesentlich. Wir erwarten hier, daß die Gitterbausteine in die Potentialminima eingebettet sind und *langreichweitige* Ordnung zeigen. Es liegt also eine kommensurable Phase vor. Somit bildet die Bedingung (5.18) die Phasengrenze zwischen der kommensurablen Phase mit langreichweitiger Ordnung und der üblichen kristallinen Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung. Dieser Phasenübergang ist kontinuierlich. Da (5.15) in der ungeordneten Phase nicht gilt, kann nicht erwartet werden, daß die Phasengrenze der kommensurablen Phase in diesen Bereich fortsetzbar ist. Sie ist daher dort nur gestrichelt eingezeichnet. Im schraffierten Bereich ist ein Phasenübergang von der kommensurablen zur ungeordneten Phase zu erwarten, dessen genaue Lage und Ordnung hier nicht diskutiert werden soll, ebenso wie die Frage, ob in diesem Bereich eine mögliche Zwischenphase existiert.

Analog zur vorhergehenden Abbildung zeigt Abbildung 5.5 nun den Phasenverlauf in einem $\bar{\sigma}$ - κ -Diagramm. Hier ist $T = \frac{J}{64\pi}$ fest gewählt. Man sieht, daß auch hier bei genügend niedriger Unordnungsstärke eine kommensurable Phase existiert, die bei niedrigen Werten von κ in die ungeordnete Phase übergeht, während bei steigendem κ die kristalline Zwischenphase zu finden ist.

Darstellung 5.6 zeigt das $\bar{\sigma}$ - T -Diagramm für ein festes Verhältnis zwischen den Lamé-Koeffizienten $\kappa = 2$, welches von realen Systemen durchaus angenommen werden kann. Dieses Diagramm ist mit Abbildung 4.5 zu vergleichen. Die kommensurable Phase, die bei tiefen Temperaturen und geringer Unordnungsstärke auftritt, ist durch eine gerade Phasengrenze von der kristallinen Phase separiert. Bei sehr niedrigen Temperaturen geht sie direkt in die ungeordnete Phase über. Lehen [30] hat ein solches Phasendiagramm für ein ungeordnetes XY-Spinsystem

5.2. PHASENDIAGRAMM BEI UNTERLIEGENDEM SUBSTRAT

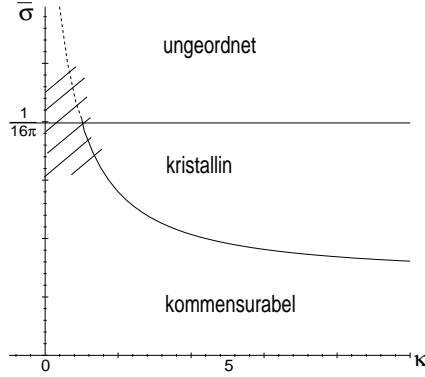


Abbildung 5.3: Phasendiagramm des Dreiecksgitters bei $n = 6$: $\bar{\sigma}$ in Abhängigkeit von κ bei gegebener Temperatur $T = \frac{J}{64\pi}$.

gefunden, welches nicht durch ein Substrat, sondern durch ein äußeres Magnetfeld gestört wird. Neben den auch hier gefundenen Phasen mit vergleichbaren Phasengrenzen, diskutiert er im schraffierten Bereich die Existenz einer zusätzlichen superrauen Zwischenphase ($\ln^2 r$ -Abhängigkeit der Korrelationsfunktion), deren Grenzen aber nicht genau bestimmt werden können.

Festzuhalten bleibt, daß sich die Grenze der kommensurablen Phase mit steigendem n nach links verschiebt, der schraffierte Bereich entfällt dann. Bei niedrigeren Werten von n allerdings verschiebt sich diese Grenze nach rechts. Für $n < 4$ befindet sie sich soweit rechts, daß die kristalline Phase nicht mehr auftritt. Hier existiert dann der vorne beschriebene Kosterlitz-Thouless-Schmelzübergang nicht mehr, sondern lediglich die kommensurable und die ungeordnete Phase. Somit ist insbesondere für $a = b$ kein Kosterlitz-Thouless-Schmelzübergang zu erwarten.

Abbildung 5.7 zeigt abschließend noch einmal eine dreidimensionale Darstellung der oben diskutierten Phasengrenzen. Im linken Bereich bei kleinen Werten von $\bar{\sigma}$ und $\frac{T}{J}$ befindet sich die kommensurable Phase, während im rechten Bereich, bei hohen Werten von $\frac{T}{J}$ und κ , die ungeordnete Phase vorliegt. Die kristalline Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung befindet sich zwischen den beiden Phasengrenzflächen.

A separate downloading of this figure is possible.

Abbildung 5.7: Dreidimensionales Phasendiagramm des Dreiecksgitters bei $n = 6$: Hier sind die Unordnungsstärke $\bar{\sigma}$, $\frac{T}{J}$ und κ gegeneinander aufgetragen. Die Fortsetzung der Phasengrenze zwischen kommensurabler und kristalliner Phase in den Bereich der ungeordneten Phase hinein ist, wie bereits erwähnt, nicht korrekt, aus Gründen der Anschaulichkeit hier aber dennoch eingezeichnet.

Neben den beschriebenen kommensurablen Situationen, in denen die primitiven Gittervektoren des aufliegenden Films und des Potentialminimagitters bis auf einen Faktor n gleich sind, existieren auch kommensurable Situationen, bei denen dies nicht der Fall ist. Abbildung 5.8 zeigt ein solches Beispiel. Hier ist

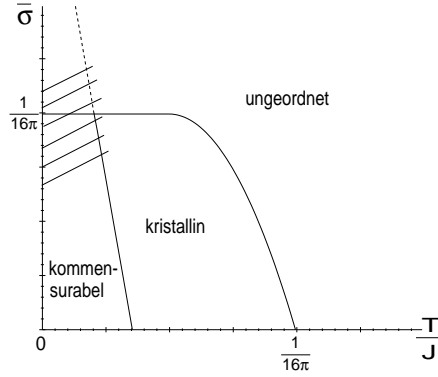


Abbildung 5.4: Phasendiagramm des Dreiecksgitters bei $n = 6$: Unordnungsstärke $\bar{\sigma}$ in Abhängigkeit der Temperatur, $\kappa = 2$ ist hier fest gewählt.

das Dreiecksgitter der Potentialminima gegenüber dem Dreiecksgitter des Films (weiße Punkte) um 30 Grad gedreht.

A separate downloading of this figure is possible.

Abbildung 5.8: Potential der Wechselwirkung zwischen einem Film (weiße Punkte) und einem kommensurablen Substrat. Die beiden Dreiecksgitter sind um 30 Grad zueinander gedreht.

Hier ist $a = \sqrt{3}b$. Möchte man die Situation analog zu (5.1) verallgemeinern, so gilt

$$a = n\sqrt{3}b. \quad (5.27)$$

Geht man wie in Abschnitt 5.1 vor, so findet man anstelle der Bedingung (5.18) in diesem Fall:

$$\frac{T(3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)} + \frac{\sigma\Omega_0^2(\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2} > \frac{2a^2}{16\pi^2n^2}. \quad (5.28)$$

Als kritischer Wert ergibt sich daraus $n_{krit} = 2$.

In analoger Weise lassen sich alle kommensurablen Situationen behandeln, bei denen sich nicht mehr als ein Kristallbaustein in einem Potentialminimum befindet.

Nicht diskutiert wurden in diesem Kapitel

- Kommensurable Substrate höherer Ordnung mit einer Gitterkonstanten

$$b = pa, \quad (5.29)$$

wobei p eine natürliche Zahl ist. Hier befinden sich dann p Kristallbausteine in einer Potentialmulde. Nach [29] wird in diesem Fall die rechte Seite der Ungleichung (5.18) proportional zu $\frac{b^2}{p^2}$. Insgesamt ist also wiederum eine Proportionalität zu a^2 festzustellen, wie schon im Fall $b = a$. Es kann also bei diesen Substraten ebenfalls kein Kosterlitz-Thouless-Schmelzen auftreten.

- Inkommensurable Substrate mit einer Gitterkonstanten der Form

$$b = \frac{p}{n}(a - \delta), \quad (5.30)$$

hierbei ist $\delta = \frac{b-a}{a}$ der *Misfit* zwischen den beiden Gitterkonstanten. Entsprechend [31] ist mit steigendem Misfit ein Absenken der Phasengrenze der kommensurablen Phase zu niedrigeren Temperaturen und Unordnungsstärken zu erwarten, bis zu einem kritischen Wert von δ , bei dem die kommensurable Phase vollständig verschwindet.

- Substrate mit beliebiger Gitterkonstante, die aber gegenüber dem Gitter des kristallinen Films gedreht sind; die Symmetrieachsen der beiden Gitter sind also nicht parallel. Sofern eine kristalline Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung und damit ein Kosterlitz-Thouless-Schmelzübergang in die hexatische Phase existieren, findet man in (2.42) zwei verschiedene Kopplungskonstanten für den Logarithmus-Term und den Winkelterm, die unterschiedlich renormieren [14].

5.2. PHASENDIAGRAMM BEI UNTERLIEGENDEM SUBSTRAT

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das Schmelzen zweidimensionaler kristalliner Filme bei vorliegenden eingefrorenen Verunreinigungen untersucht. Im Rahmen der Kosterlitz-Thouless-Theorie wird ein zweistufiges Schmelzen mittels zwei kontinuierlicher Phasenübergänge erwartet. Zunächst geht die kristalline Phase mit quasi-langreichweitiger Translationsordnung (algebraische abfallende Translations-Korrelationsfunktion) in eine hexatische bzw. tetratische Flüssigkristall-Phase über, die keine Translationsordnung mehr aufweist, aber noch quasi-langreichweitige Orientierungsordnung zeigt. Beim zweiten Phasenübergang in die isotrop flüssige Phase geht auch diese verloren. Gegenstand dieser Arbeit ist lediglich der erste Phasenübergang in die Flüssigkristall-Phase.

Dieser ist bereits von Nelson [2] im Falle glatter Substrate betrachtet worden. Er fand bei tiefen Temperaturen und Unordnungsstärken $\bar{\sigma} > 0$ einen Wiedereintritt in die Flüssigkristall-Phase ohne Translationsordnung. Im Bereich $T < \frac{J\bar{\sigma}}{2}$, der den gesamten Wiedereintritt umfaßt, führen die von ihm gefundenen Renormierungsflußgleichungen der Kopplungskonstanten J und der Fugazität y allerdings zu einem Absinken der Entropie bei Renormierung und zu negativen Entropiewerten auf großen Längenskalen. Grund hierfür war, daß Nelson für die Wahrscheinlichkeit einen Versetzungsdipol vorzufinden eine Boltzmann-Verteilung angesetzt hat, die im Bereich des Wiedereintritts sehr große Werte annimmt. Damit wird dort aber auch die Fugazität sehr groß und die übliche Näherung für kleine Fugazitäten kann nicht mehr angewendet werden.

In dieser Arbeit wird eine *normierte* Dipolwahrscheinlichkeit angesetzt, die Versetzungen als nicht wechselwirkende Fermionen behandelt. Dies geschieht in Anlehnung an eine Arbeit von Nattermann, Scheidl, Li und Korshunov [3], die dieses Konzept für das ungeordnete XY-Spinsystem entwickelt haben, wo Vortices als topologische Defekte auftreten. Renormierung mit Hilfe eines dielektrischen Formalismus liefert Flußgleichungen für die Kopplungskonstante und die Fugazität, die für $T > \frac{J\bar{\sigma}}{2}$ mit den von Nelson gefundenen Gleichungen übereinstimmen. Eine Renormierung der Unordnungsstärke wird nicht untersucht. Das aus den Flußgleichungen resultierende Phasendiagramm zeigt keinen Wiedereintritt, im Bereich $T < \frac{J\bar{\sigma}}{2}$ verläuft die Phasengrenze zwischen fester Phase und Flüssigkristall-Phase parallel zur Temperaturachse bei einem Wert von $\bar{\sigma}_c = \frac{1}{16\pi}$. Abbildung

4.5 zeigt das Phasendiagramm noch einmal. Dieses Resultat stimmt mit den Abschätzungen der Arbeit von Cha und Fertig [7] überein. Ein Absinken der Entropie bei Renormierung wird nicht mehr gefunden.

Zusätzlich wurde der Einfluß eines periodischen Substratpotentials nicht-glatte Substrate untersucht. Diese Analyse beschränkte sich auf kommensurable Situationen, bei denen die Potentialminima den selben Gittertyp bilden wie der aufliegende kristalline Film. Hat der Film die Gitterkonstante a und das Gitter der Potentialminima die Gitterkonstante b , so wurde $a = n b$ gefordert, wobei n eine natürliche Zahl ist. Es konnte gezeigt werden, daß die Wechselwirkung mit dem Substrat nur dann die Ausbildung einer kristallinen Phase mit quasi-langreichweitiger Translationsordnung zuläßt, wenn $n \geq 4$ erfüllt ist, das Substrat somit schnell moduliert (vgl. Abbildung 5.3). Anderenfalls, also auch für $a = b$, verschwindet diese Phase völlig und damit auch der oben beschriebene Phasenübergang. An ihre Stelle tritt eine kommensurable Phase mit langreichweitiger Ordnung, die direkt schmilzt. Für $n \geq 4$ existiert diese kommensurable Phase zwar auch, geht aber zunächst in die kristalline Phase mit quasi-langreichweitiger Ordnung über, bevor dann der in dieser Arbeit behandelte Phasenübergang eintritt (vgl. Abbildung 5.5).

Ein Vergleich mit Experimenten und Simulationen bringt keine direkte Bestätigung der Ergebnisse dieser Arbeit, da sich sowohl Experimente als auch Simulationen bisher auf die Frage nach der Richtigkeit der Kosterlitz-Thouless-Beschreibung beschränken und daher noch keine Arbeiten vorliegen, die versuchen den Einfluß von Unordnung oder verschiedenen Substratpotentialen auf den Schmelzvorgang explizit zu untersuchen. Dennoch scheint das Verhalten von adsorbiertem Krypton auf einem kommensurablen Graphitgitter die hier erzielten Resultate zu bestätigen.

Mit dieser Arbeit konnte somit das in jüngster Zeit gefundene Verhalten des ungeordneten XY-Modells auf das verwandte Modell zweidimensionaler Gitter mit eingefrorenen Verunreinigungen übertragen werden.

Anhang A

Coulombgas-Beschreibung

A.1 Abbildung auf ein Coulombgas

Ausgehend von (2.40) und unter Verwendung der Formeln (2.36) und (2.39) erhält man:

$$H_{el} = \frac{J}{16\pi} \int \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|>1} d^2r d^2r' b_i(\mathbf{r}) \epsilon_{ij} \nabla_j b_k(\mathbf{r}') \epsilon_{kl} \nabla'_l (\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 (\ln |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| + C) \quad (\text{A.1})$$

Benutzt man $\mathbf{b}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \mathbf{b}_{\alpha} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\alpha})$, so resultiert mit einer modifizierten von Nelson [24] benutzten Konstanten $\tilde{C} = C + \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} H_{el} &= -\frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} b_{\alpha i} \epsilon_{ij} \nabla_j b_{\beta k} \epsilon_{kl} (x_{\alpha l} - x_{\beta l}) \left(\ln |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}| + \tilde{C} \right) \\ &= -\frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} b_{\alpha i} b_{\beta i} \left(\ln |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}| + \tilde{C} \right) + \frac{b_{\alpha i} \epsilon_{ij} (x_{\alpha j} - x_{\beta j}) b_{\beta k} \epsilon_{kl} (x_{\alpha l} - x_{\beta l})}{(\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})^2} \\ &= -\frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} b_{\alpha i} b_{\beta i} \left(\ln |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}| + \tilde{C} \right) + b_{\alpha i} b_{\beta i} \\ &\quad - \frac{(b_{\alpha i} (x_{\alpha i} - x_{\beta i})) (b_{\beta j} (x_{\alpha j} - x_{\beta j}))}{(\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})^2} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Unter Benutzung der Ladungsneutralität $\sum \mathbf{b}_{\alpha} = 0$ gilt die Beziehung

$$-(\tilde{C} + 1) \sum_{\alpha \neq \beta} \mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{b}_{\beta} = (\tilde{C} + 1) \sum_{\alpha} \mathbf{b}_{\alpha}^2. \quad (\text{A.3})$$

Definiert man nun $E_C = (\tilde{C} + 1)J/8\pi$ als Energie eines Versetzungskerns, so erhält man direkt Formel (2.42), welche zu zeigen war:

$$H_{el} = -\frac{J}{8\pi} \sum_{\alpha \neq \beta} \left(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{b}_{\beta} \ln |\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}| - \frac{(\mathbf{b}_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha\beta})(\mathbf{b}_{\beta} \mathbf{r}_{\alpha\beta})}{r_{\alpha\beta}^2} \right) + E_C \sum_{\alpha} |\mathbf{b}_{\alpha}|^2 \quad (\text{A.4})$$

Dies ist exakt das Ergebnis von Nelson [2, 24]. Young [13] hat eine leicht andere Definition von E_C benutzt und daher mit einem zusätzlichen Term in

A.1. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

der Hamiltonfunktion gearbeitet. Wir folgen im weiteren aber dem Formalismus von Nelson. \tilde{C} ist eine positive Konstante, deren Wert von der Gitterstruktur abhängt, sie mißt das Verhältnis von Kerndurchmesser zu Gitterkonstante. Ihr Wert ist von der Ordnung $O(1)$, für das Quadratgitter wurde $\tilde{C} \approx \frac{\pi}{2}$ berechnet. Da für die Erzeugung eines Versetzungsdipols mit Separation 1 ($a = 1$: Gitterkonstante) maximal die Energie $2E_C$ aufgewendet werden muß, kann E_C tatsächlich als Energie eines Versetzungskerns bezeichnet werden.

A.2 Vergleich mit der Elektrodynamik

In diesem Abschnitt sollen die in dieser Arbeit auftretenden elastizitätstheoretischen Größen mit den analogen elektrodynamischen Größen verglichen werden. Die folgende Tabelle zeigt die wesentlichen Relationen

Elastizitätstheorie

Quellenfunktion

$$\eta(\mathbf{r}) = \epsilon_{ij} \nabla_i \sum_{\alpha} b_{\alpha,i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})$$

Greenfunktion

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi} r^2 \ln |\mathbf{r}|$$

Verzerrungsfunktion

$$\chi(\mathbf{r}) = J \int d^2 r' \eta(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

elastische Energie

$$H_{el} = \frac{1}{2} \int d^2 r \eta(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r})$$

und

$$\nabla^4 \chi(\mathbf{r}) = J \eta(\mathbf{r}) = \frac{4\pi \eta(\mathbf{r})}{\varepsilon}$$

mit $\varepsilon = \frac{4\pi}{J}$.

Elektrodynamik

Ladungsdichte

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \varrho_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})$$

Greenfunktion

$$g(\mathbf{r}) = \ln |\mathbf{r}|$$

elektrostat. Potential

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int d^2 r' \varrho(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Energie

$$H = \frac{1}{2} \int d^2 r \varrho(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r})$$

Poisson-Gleichung

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi \varrho(\mathbf{r})}{\varepsilon}$$

A.1. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

Im folgenden wird die elektrodynamische Mittelung über atomare bzw. molekulare Strukturen verglichen mit der Mittelung über Dipole aus Burgers-Vektoren. Die elektrodynamische Vorgehensweise entspricht der von Jackson (1963).

Elastizitätstheorie

Die Quellenfunktion eines Dipols Γ ist in inneren Koordinaten $\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}$ (3.9):

$$\tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)})$$

Die Verzerungsfunktion bei \mathbf{r} erzeugt durch Dipol Γ , dessen Zentrum bei \mathbf{r}_{Γ} liegt, ist

$$\chi_{\Gamma}(\mathbf{r}) = J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma} - \boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)})$$

Entwicklung dieses Ausdrucks für $|\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}| \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}|$:

$$\begin{aligned} \chi_{\Gamma}(\mathbf{r}) = & J \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) \\ & + \frac{J}{2} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \rho_i^{(\Gamma)} \rho_j^{(\Gamma)} \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma})}{\partial x_{\Gamma i} \partial x_{\Gamma j}} \end{aligned}$$

(kein Term erster Ordnung)

Gesamtverzerrungsfunktion durch Summation über alle Dipole

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\Gamma} \chi_{\Gamma}(\mathbf{r})$$

nur 1. Term

$$\begin{aligned} \chi_1(\mathbf{r}) = & J \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) \\ = & J \int d^2 r'' \eta^{Dip}(\mathbf{r}'') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \end{aligned}$$

mit

$$\eta^{Dip}(\mathbf{r}'') = \sum_{\Gamma} \int d^2 \rho^{(\Gamma)} \tilde{\eta}_{\Gamma}(\boldsymbol{\rho}^{(\Gamma)}) \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}_{\Gamma})$$

Elektrodynamik

Die Ladungsdichte des j-ten Moleküls ist in internen Koordinaten \mathbf{r}' :

$$\varrho'_j(\mathbf{r}')$$

Das Potential bei \mathbf{r} erzeugt durch das j-te Molekül mit Zentrum bei \mathbf{r}_j ist

$$\Phi_j(\mathbf{r}) = \int d^3 r' \varrho'_j(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{r}')$$

Entwicklung dieses Ausdrucks für $|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$:

$$\begin{aligned} \Phi_j(\mathbf{r}) = & \int d^3 r' \varrho'_j(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \\ & + \int d^3 r' \varrho'_j(\mathbf{r}') x'_k \frac{\partial g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)}{\partial x_{j,k}} \end{aligned}$$

Gesamtpotential durch Summation über alle Moleküle

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_j \Phi_j(\mathbf{r})$$

nur 1. Term

$$\begin{aligned} \Phi_1(\mathbf{r}) = & \sum_j \int d^3 r' \varrho'_j(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \\ = & \int d^2 r' \varrho_{mol}(\mathbf{r}'') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \end{aligned}$$

mit

$$\varrho_{mol}(\mathbf{r}'') = \sum_j \int d^3 r' \varrho'_j(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}_j)$$

A.1. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

Mittelung über Flächen, die größer sind als quadrierte maximale Dipolseparation $\Delta A \gg \zeta^2$:

$$\begin{aligned}\langle \chi_1(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{\Delta A} \int_{\Delta A} d^2 \xi \chi_1(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}) \\ &= \frac{J}{\Delta A} \int_{\Delta A} d^2 \xi \int d^2 r'' \eta^{Dip}(\mathbf{r}'' + \boldsymbol{\xi}) \\ &\quad \times g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\ &= J \int d^2 r'' \langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}'') \rangle g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')\end{aligned}$$

Damit makroskopische Quellenfunktion

$$\langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle_{\Delta N} n(\mathbf{r})$$

wobei

$$\begin{aligned}\langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle_{\Delta N} &: \text{Durchschnittsquellen-} \\ &\quad \text{funktion pro Dipol} \\ n(\mathbf{r}) &: \text{makroskop. Dipoldichte}\end{aligned}$$

d.h, wenn in ΔA durchschnittlich ΔN Dipole:

$$\langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle_{\Delta N} = \frac{1}{\Delta N} \int_{\Delta A} d^2 \xi \eta^{Dip}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi})$$

Erlaube nun Dipole mit großer Separation $r > \zeta$. Die makroskopische Quellenfunktion wird zu:

$$\eta^\zeta(\mathbf{r}) = \langle \eta^{Dip}(\mathbf{r}) \rangle + \eta_{ex}(\mathbf{r})$$

Analoge Mittelung für zweiten Term der entwickelten Verzerrungsfunktion liefert makroskop. Dipoltensor $C_{ij}^\zeta(\mathbf{r})$. Damit wird die makroskop. Gesamtverzerrungsfunktion

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{r}) &= J \int d^2 r' \eta^\zeta(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &\quad + J \int d^2 r' C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}') \frac{\partial^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x'_i \partial x'_j}\end{aligned}$$

Mittelung über Volumina, die größer sind als die maximalen Molekülvolumina

$\Delta V \gg V_{mol}$:

$$\begin{aligned}\langle \Phi_1(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} d^3 \xi \Phi_1(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}) \\ &= \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} d^3 \xi \int d^3 r'' \varrho_{mol}(\mathbf{r}'' + \boldsymbol{\xi}) \\ &\quad \times g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \\ &= \int d^3 r'' \langle \varrho_{mol}(\mathbf{r}'') \rangle g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')\end{aligned}$$

Damit makroskopische Ladungsdichte

$$\langle \varrho_{mol}(\mathbf{r}) \rangle = \langle e_{mol}(\mathbf{r}) \rangle n(\mathbf{r})$$

wobei

$$\begin{aligned}\langle e_{mol}(\mathbf{r}) \rangle &: \text{Durchschnittsladung} \\ &\quad \text{pro Molekül} \\ n(\mathbf{r}) &: \text{makroskop. Moleküldichte}\end{aligned}$$

d.h, wenn in ΔV durchschnittlich ΔN Moleküle:

$$\langle e_{mol}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\Delta N} \int_{\Delta V} d^3 \xi \varrho_{mol}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi})$$

Erlaube nun freie, von Molekülen unabhängige, Ladungen. Die makroskopische Ladungsdichte wird zu:

$$\varrho(\mathbf{r}) = \langle \varrho_{mol}(\mathbf{r}) \rangle + \varrho_{ex}(\mathbf{r})$$

Analoge Mittelung für zweiten Term des entwickelten Potentials V liefert makroskopisches Dipolmoment $\mathbf{p}(\mathbf{r})$. Damit wird das makroskopische Gesamtpotential

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{r}) &= \int d^3 r' \varrho(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &\quad + \int d^3 r' p_i(\mathbf{r}') \frac{\partial g(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x'_i}\end{aligned}$$

A.1. ABBILDUNG AUF EIN COULOMBGAS

Partielle Integration und Ableiten liefern

$$\begin{aligned}\frac{\nabla^4 \chi(\mathbf{r})}{J} &= \eta^\zeta(\mathbf{r}) + \int d^3 r' \frac{\partial^2 C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}')}{\partial x'_i \partial x'_j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= \eta^\zeta(\mathbf{r}) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} C_{ij}^\zeta(\mathbf{r})\end{aligned}$$

Mit Linear Response geben die Symmetrien des Dreiecksgitters

$$\begin{aligned}C_{ij}^\zeta(\mathbf{r}) &= \sum_{kl} a_{ijkl}(\zeta) \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_l} \\ &= \frac{1}{2} C_1(\zeta) \left(\frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_i} \right) \\ &\quad + C_2(\zeta) \delta_{ij} \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_l}\end{aligned}$$

Nun kann die dielektrische Konstante berechnet werden

$$\begin{aligned}\varepsilon(\zeta) \nabla^4 \chi(\mathbf{r}) &= 4\pi \eta^\zeta(\mathbf{r}) \\ &= \frac{4\pi}{J} \nabla^4 \chi(\mathbf{r}) \\ &\quad - 4\pi (C_1(\zeta) + C_2(\zeta)) \nabla^4 \chi(\mathbf{r})\end{aligned}$$

Somit gilt für ε

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - 4\pi(C_1 + C_2)$$

Die elektrische Suszeptibilität κ ist also

$$\kappa = -C_1 - C_2.$$

Partielle Integration und Ableiten liefern

$$\begin{aligned}\frac{\nabla^2 \Phi(\mathbf{r})}{4\pi} &= -\varrho(\mathbf{r}) + \int d^3 r' \frac{\partial p_i(\mathbf{r}')}{\partial x'_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= -\varrho(\mathbf{r}) + \frac{\partial}{\partial x_i} p_i(\mathbf{r})\end{aligned}$$

Mit Linear Response geben die Symmetrien des isotropen Systems

$$\begin{aligned}p_i(\mathbf{r}) &= \sum_k a_{ik} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial x_k} \\ &= -\chi_{el} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial x_i}\end{aligned}$$

Nun kann die dielektrische Konstante berechnet werden

$$\begin{aligned}\varepsilon \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) &= -4\pi \varrho(\mathbf{r}) \\ &= \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) + 4\pi \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \Phi(\mathbf{r})}_{\nabla^2 \Phi} \chi_{el}\end{aligned}$$

Somit gilt für ε

$$\varepsilon = 1 + 4\pi \chi_{el}$$

Die elektrische Suszeptibilität ist also χ_{el} .

Anhang B

Unordnungswechselwirkung

B.1 Varianz bei einer einzelnen freien Versetzung

Entsprechend Formel (2.63) beträgt die Varianz der Wechselwirkung mit der Unordnung unter Berücksichtigung der Translationsinvarianz des Systems

$$\varepsilon(R) = [V(\mathbf{r}_\alpha)^2]_D = [V(\mathbf{0})^2]_D. \quad (\text{B.1})$$

Nach (2.54) gilt

$$V(\mathbf{0}) = \frac{J}{4\pi} \Omega_0 b_i \epsilon_{ij} \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \nabla_j \ln |\mathbf{r}|. \quad (\text{B.2})$$

Mit Hilfe der Relationen $[\delta c(\mathbf{r}) \delta c(\mathbf{r}')]_D = \sigma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ und $\bar{\sigma} = \sigma \Omega_0^2$ ergibt sich

$$\begin{aligned} [V(\mathbf{0})^2]_D &= \left[\frac{J^2 \Omega_0^2}{16\pi^2} b_i \epsilon_{ij} \int d^2 r \delta c(\mathbf{r}) \nabla_j \ln |\mathbf{r}| b_k \epsilon_{kl} \int d^2 r' \delta c(\mathbf{r}') \nabla'_l \ln |\mathbf{r}'| \right]_D \\ &= \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int d^2 r \nabla_j \ln |\mathbf{r}| \nabla_l \ln |\mathbf{r}| \\ &= \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi^2} \left[b_x^2 \int d^2 r \frac{y^2}{r^4} + b_y^2 \int d^2 r \frac{x^2}{r^4} - 2b_x b_y \int d^2 r \frac{xy}{r^4} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Unter Verwendung des Cut-Offs 1 für die Integration folgt schließlich die Behauptung aus (2.63)

$$\begin{aligned} [V(\mathbf{0})^2]_D &= \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi^2} \left[b_x^2 \ln R \int_0^{2\pi} d\phi \sin^2 \phi + b_y^2 \pi \ln R - 0 \right] \\ &= \frac{J^2}{16\pi} \bar{\sigma} \ln R. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

B.2 Varianz bei einem Versetzungsdipol

Nach (2.70) gilt für die Varianz der Unordnungswechselwirkung eines Versetzungsdipols

$$\Delta^2(r, \theta) = [(V(\mathbf{r}) + V(\mathbf{0}))^2]_D = 2[V(\mathbf{0})V(\mathbf{0}) + V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D. \quad (\text{B.5})$$

Aufgrund der Berechnungen aus B.1 ist nur noch notwendig $[V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D$ zu untersuchen. Mit (2.54) hat man hier bei analogem Vorgehen zu B.1

$$\begin{aligned} [V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D &= \left[\frac{J^2 \Omega_0^2}{16\pi^2} b_{\alpha i} \epsilon_{ij} \int d^2 r' \delta c(\mathbf{r}') \nabla'_j \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \right. \\ &\quad \left. \times b_{\beta k} \epsilon_{kl} \int d^2 r'' \delta c(\mathbf{r}'') \nabla''_l \ln |\mathbf{r}''| \right]_D \\ &= \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi^2} b_{\alpha i} \epsilon_{ij} b_{\beta k} \epsilon_{kl} \int d^2 r' \nabla'_j \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \nabla'_l \ln |\mathbf{r}'|. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Da für einen Versetzungsdipol $\mathbf{b}_\alpha = -\mathbf{b}_\beta$ gilt, kann auf die Unterscheidung verzichtet werden, wenn man obige Gleichung mit (-1) multipliziert. Verwendet man die Relation $\Delta(\mathbf{r}^2 \ln |\mathbf{r}|) = 4 + 4 \ln |\mathbf{r}|$, so ergibt sich, da die Konstante bei nochmaliger Differentiation wegfällt

$$[V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D = -\frac{1}{4} \frac{J^2 \bar{\sigma}}{16\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int d^2 r' \nabla'_j \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \nabla'_l \Delta'(\mathbf{r}'^2 \ln |\mathbf{r}'|). \quad (\text{B.7})$$

Zweifache partielle Integration liefert als Hauptterm H

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}, \mathbf{0}) &= -\frac{J^2 \bar{\sigma}}{64\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int d^2 r' \nabla'_j \Delta' \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \nabla'_l (\mathbf{r}'^2 \ln |\mathbf{r}'|) \\ &= -\frac{J^2 \bar{\sigma}}{32\pi} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \nabla_j \nabla_l (\mathbf{r}^2 \ln |\mathbf{r}|), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

wobei letzteres nur für Separationen $r \gg 1$ gilt. Wendet man hierauf das in (A.1) bis (A.4) beschriebene Vorgehen an, so erhält man unter Vernachlässigung von konstanten Beiträgen

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{0}) = \frac{J^2}{16\pi} \bar{\sigma} (\ln |\mathbf{r}| - \cos^2 \theta). \quad (\text{B.9})$$

Es gilt nun die Randterme der partiellen Integration zu betrachten. In zwei Dimensionen hat man für den Laplace-Operator dargestellt in Polarkoordinaten $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$. Beschränkt man sich zunächst auf die erste partielle Integration für den ersten Term des Laplace-Operators, so ist der Randtermbeitrag R_{r1}

$$R_{r1}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) = -\frac{J^2 \bar{\sigma}}{64\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int d\phi r' \nabla'_j \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \nabla'_l \frac{\partial}{\partial r'} (r'^2 \ln r') \Big|_1^R. \quad (\text{B.10})$$

Mit Hilfe der Relationen

$$\begin{aligned} \nabla'_j \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| &= \frac{x'_j - x_j}{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2} \\ \nabla'_l \frac{\partial}{\partial r'} (r'^2 \ln r') &= \frac{1}{r'} (3x'_l + 2x'_l \ln r'), \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

erhält man somit

$$\begin{aligned} R_{r1}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) &= -\frac{J^2 \bar{\sigma}}{64\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{x'_j - x_j}{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2} (3x'_l + 2x'_l \ln r') \Big|_1^R \\ &= -\frac{J^2}{32\pi} \bar{\sigma} \ln R, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

wobei von $x' = r' \cos \phi$ und $y' = r' \sin \phi$ Gebrauch gemacht wurde.

Die zweite partielle Integration des ersten Laplace-Terms hat den Randterm

$$R_{r2}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) = \frac{J^2 \bar{\sigma}}{64\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int d\phi r' \nabla'_j \frac{\partial}{\partial r'} \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \nabla'_l (r'^2 \ln r') \Big|_1^R. \quad (\text{B.13})$$

Hier gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} \nabla'_j \frac{\partial}{\partial r'} \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| &\approx -\frac{x'_j - x_j}{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2 r'} \\ \nabla'_l (r'^2 \ln r') &= x'_l + 2x'_l \ln r', \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

die analog zu oben eingesetzt folgendes ergeben

$$\begin{aligned} R_{r2}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) &= \frac{J^2 \bar{\sigma}}{64\pi^2} b_i \epsilon_{ij} b_k \epsilon_{kl} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{x'_j - x_j}{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2} (x'_l + 2x'_l \ln r') \Big|_1^R \\ &= -\frac{J^2}{32\pi} \bar{\sigma} \ln R. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Die beiden Randterme liefern also den gleichen Beitrag. Die Beiträge durch die Randterme der partiellen Intergration für den zweiten Teil des Laplace-Operators ($\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$) sind 0, da hier nur Integrale der Form

$$\int_1^R dr f(r, \cos \phi, \sin \phi) \Big|_0^{2\pi} \quad (\text{B.16})$$

auftreten. Es gilt also insgesamt

$$\begin{aligned} [V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D &= H(\mathbf{r}, \mathbf{0}) + R_{r1}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) + R_{r2}(\mathbf{r}, \mathbf{0}) \\ &= \frac{J^2}{16\pi} \bar{\sigma} (\ln r - \cos^2 \theta - \ln R). \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Abschließend kann festgestellt werden, daß die Varianz für Separationen $r \gg 1$ den in (2.70) angegebenen Wert annimmt

$$\begin{aligned} \Delta^2(r, \theta) &= 2 [V(\mathbf{0})V(\mathbf{0}) + V(\mathbf{r})V(\mathbf{0})]_D \\ &= \frac{J^2}{8\pi} \bar{\sigma} (\ln r - \cos^2 \theta). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Dieses Resultat wurde auch von Nelson [2] bei der Berechnung der von ihm benutzten replizierten Hamiltonfunktion verwendet.

B.2. VARIANZ BEI EINEM VERSETZUNGSDIPOL

Anhang C

Berechnungen zur Polarisierbarkeit

C.1 Polarisierbarkeit in der Elektrodynamik

Dieser Abschnitt soll zeigen, daß die in Abschnitt 3.3 angewandte Methodik zur Bestimmung der Polarisierbarkeit genauso in der üblichen Elektrodynamik benutzt werden kann und daraus ihre Berechtigung erfährt.

Hierzu betrachten wir ein System von Punktladungen. Unordnung spiele keine Rolle. Die Wahrscheinlichkeit, an einem Paar von Plätzen im System mit Abstand r einen Dipol zu finden, ist Boltzmann-verteilt $p(r) \propto \exp(-\beta E)$, E ist die Wechselwirkungsenergie der beiden Ladungen.

Legt man nun ein konstantes, homogenes \mathbf{E} -Feld an das System an, so ist die Wechselwirkung eines Dipols mit diesem Feld

$$W = -\mu_i E_i. \quad (\text{C.1})$$

Hierbei ist $\mu = \mathbf{r}$ das Dipolmoment eines Dipols mit Separation r und Ladung $|q| = 1$.

Analog zu (3.53) läßt sich die *Polarisationsdichte* $q_i(r)$ als

$$q_i(r) = \frac{w_+ - w_-}{1 + w_+ + w_-} \mu_i \quad (\text{C.2})$$

mit

$$w_{\pm} = \exp[-\beta(E \pm W)] \quad (\text{C.3})$$

bestimmen. Auch hier kann Tensor A_{ij} eingeführt werden

$$A_{ij}(r) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left. \frac{\partial q_i}{\partial E_j} \right|_{E=0} \quad (\text{C.4})$$

C.2. WINKELINTEGRATION DES DIPOLTENSORS

Der Vorfaktor berücksichtigt, daß eine Orientierung in (C.2) modulo π ausgezeichnet ist. Ableiten gibt

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial q_i}{\partial E_j} \right|_{E=0} &= \beta \mu_i \mu_j \frac{(w_+ + w_-)(1 + w_+ + w_-) - (w_+ - w_-)^2}{(1 + w_+ + w_-)^2} \Big|_{E=0} \\ &= \beta \mu_i \mu_j 2 e^{-\beta E}. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Damit kann der Tensor A_{ij} berechnet werden

$$\begin{aligned} A_{ij}(r) &= \frac{1}{T} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} x_i x_j p(r) \\ &= \frac{r^2 p(r)}{2T} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Da in der Elektrodynamik in einem isotropen Medium die induzierte Polarisierung parallel zum anliegenden \mathbf{E} -Feld ist

$$P_i = \chi_e \delta_{ij} E_j, \quad (\text{C.7})$$

nimmt die Polarisierbarkeitsdichte $A(r)$, für die $\chi_e(r) = \int_0^r dr' A(r')$ gilt, folgende Form an

$$A(r) = A_{xx}(r) = A_{yy}(r) = \frac{r^2 p(r)}{2T}. \quad (\text{C.8})$$

Die *Polarisierbarkeit* $\alpha(r)$ wird damit zu

$$\alpha(r) = \frac{A(r)}{p(r)} = \frac{r^2}{2T}, \quad (\text{C.9})$$

dem aus der Elektrodynamik bekannten Ausdruck. In Abschnitt 3.3 wurde diese Methode zur Polarisierbarkeitsberechnung übertragen auf das zu untersuchende Problem eines Coulombgases mit Vektorladungen.

C.2 Winkelintegration des Dipoltensors

In diesem Abschnitt soll das Integral

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} Q_{ij} Q_{kl} e^{x \cos^2 \theta} \quad (\text{C.10})$$

gelöst werden, welches bei der Berechnung der Polarisierbarkeitsdichte immer auftritt, lediglich der Wert von x hängt vom betrachteten Temperaturbereich ab. Im weiteren wird folgende Abkürzung benutzt:

$$\langle f(r, \theta) \rangle_w := \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} f(r, \theta) e^{x \cos^2 \theta} \quad (\text{C.11})$$

Da entsprechend Gleichung (3.51) gilt

$$Q_{ij}Q_{kl} = \frac{1}{4}\epsilon_{ir}\epsilon_{js}\epsilon_{kt}\epsilon_{lu}(b_r\epsilon_{sm}x_m + b_s\epsilon_{rm}x_m)(b_t\epsilon_{un}x_n + b_u\epsilon_{tn}x_n), \quad (C.12)$$

beschränken wir uns zunächst auf die Berechnung von

$$< (b_r\epsilon_{sm}x_m + b_s\epsilon_{rm}x_m)(b_t\epsilon_{un}x_n + b_u\epsilon_{tn}x_n) >_w. \quad (C.13)$$

Mittels elementarer Integration unter Beachtung der Additionstheoreme für Cosinus und Sinus (vgl. auch Young [13]), erhält man die folgenden Beziehung

$$< x_i x_j >_w = \left\langle \frac{r^2}{2} \delta_{ij} + r^2 \left(b_i b_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right) \cos 2\theta \right\rangle_w. \quad (C.14)$$

Wendet man diese auf (C.13) an so ergibt sich unter Verwendung von $\epsilon_{ij}\epsilon_{kl} = \delta_{ik}\delta_{lj} - \delta_{il}\delta_{jk}$:

$$\begin{aligned} & < (b_r\epsilon_{sm}x_m + b_s\epsilon_{rm}x_m)(b_t\epsilon_{un}x_n + b_u\epsilon_{tn}x_n) >_w \\ &= < (b_r b_t \epsilon_{sm} \epsilon_{un} x_m x_n + b_s b_u \epsilon_{rm} \epsilon_{tn} x_m x_n \\ &\quad + b_r b_u \epsilon_{sm} \epsilon_{tn} x_m x_n + b_s b_t \epsilon_{rm} \epsilon_{un} x_m x_n) >_w \\ &= < [b_r b_t (\delta_{su} \delta_{mn} - \delta_{sn} \delta_{um}) + b_s b_u (\delta_{rt} \delta_{mn} - \delta_{rn} \delta_{tm}) \\ &\quad + b_r b_u (\delta_{st} \delta_{mn} - \delta_{sn} \delta_{tm}) + b_s b_t (\delta_{ru} \delta_{mn} - \delta_{rn} \delta_{um})] \\ &\quad \times r^2 (\delta_{mn}/2 + [b_m b_n - \delta_{mn}/2] \cos 2\theta) >_w. \end{aligned} \quad (C.15)$$

Für die Mittelung über alle Richtungen des Burgers-Vektors \mathbf{b} setzt man ein isotropes System an. Hier gilt

$$< b_m b_n >_{av} = \frac{1}{2} \delta_{mn} \quad (C.16)$$

$$< b_k b_l b_m b_n >_{av} = \frac{1}{8} (\delta_{kl} \delta_{mn} + \delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{kn} \delta_{lm}). \quad (C.17)$$

Für das Dreiecksgitter gelten beide Gleichungen wie für das isotrope System exakt, im Fall des Quadratgitters kann (C.17) als Näherung benutzt werden. Wendet man diese Mittelung nun auf (C.15) an, so resultiert

$$\begin{aligned} & < (b_r\epsilon_{sm}x_m + b_s\epsilon_{rm}x_m)(b_t\epsilon_{un}x_n + b_u\epsilon_{tn}x_n) >_w \\ &= \left\langle \frac{r^2}{2} (\delta_{rt} \delta_{su} + \delta_{ru} \delta_{ts}) - \frac{r^2}{2} \cos 2\theta \delta_{rs} \delta_{tu} \right\rangle_w. \end{aligned} \quad (C.18)$$

Mit der Umformung $\exp(x \cos^2 \theta) = \exp(\frac{x}{2}) \exp(\frac{x}{2} \cos 2\theta)$ und unter Benutzung der modifizierten Besselfunktionen I_0 und I_1 , die wie folgt definiert sind

$$I_0(x) := \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{x \cos 2\theta} \quad (C.19)$$

$$I_1(x) := \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos 2\theta e^{x \cos 2\theta},$$

findet man schließlich für das gesuchte Resultat

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} Q_{ij} Q_{kl} e^{x \cos^2 \theta} \\ &= \frac{1}{4} \epsilon_{ir} \epsilon_{js} \epsilon_{kt} \epsilon_{lu} e^{\frac{x}{2}} [Q_1(r)(\delta_{rt} \delta_{su} + \delta_{ru} \delta_{ts}) + Q_2(r) \delta_{rs} \delta_{tu}], \end{aligned} \tag{C.20}$$

wobei

$$\begin{aligned} Q_1(r) &= \frac{1}{2} r^2 I_0 \left(\frac{x}{2} \right) \\ Q_2(r) &= -\frac{1}{2} r^2 I_1 \left(\frac{x}{2} \right). \end{aligned} \tag{C.21}$$

Diese Relation erlaubt die Berechnung der Polarisierbarkeiten und Polarisierbarkeitsdichten in Abschnitt 3.3.

Anhang D

Mittelung des Ordnungsparameters

Unter Verwendung der Methoden von Nelson [2] soll in diesem Abschnitt der in Kapitel 5 (5.15) verwendete Ausdruck für den Ordnungspar. $[\langle \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D$ hergeleitet werden. Hierbei steht $\langle \dots \rangle$ für eine thermische Mittelung und $[\dots]_D$ für die Mittelung über die möglichen Unordnungskonfigurationen. Wir betrachten das System auf sehr großen Längenskalen, wo Versetzungen in der kristallinen Phase keine Rolle mehr spielen, da sie zu Dipolen mit kleinerer Separation gebunden sind. Folglich kann bei der thermischen Mittelung ein rein phononisches Verschiebungsfeld angesetzt werden, welches Gauß-verteilt ist.

D.1 Berechnung ohne Unordnung

Zunächst betrachten wir ein System, das keine Verunreinigungen aufweist; in der Hamiltonfunktion wird δc null gesetzt. Mit einem beliebigen reziproken Gittervektor \mathbf{G} und dem Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ kann man den Ordnungsparameter entwickeln

$$\langle \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} i^n \frac{\langle (\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r}))^n \rangle}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\langle (\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r}))^{2n} \rangle}{(2n)!}, \quad (\text{D.1})$$

die ungeraden Terme der Entwicklung fallen weg, da über eine gaußsche Wahrscheinlichkeits-Verteilung gemittelt wird. Das Wick-Theorem liefert nun

$$\langle (\mathbf{G}\mathbf{u})^{2n} \rangle = \frac{(2n)!}{2^n n!} \langle (\mathbf{G}\mathbf{u})^2 \rangle^n. \quad (\text{D.2})$$

Somit ist

$$\langle \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle = \sum_n \left(-\frac{1}{2}\right)^n \frac{\langle (\mathbf{G}\mathbf{u})^2 \rangle^n}{n!} = \exp\left(-\frac{1}{2} \langle (\mathbf{G}\mathbf{u})^2 \rangle\right), \quad (\text{D.3})$$

was es notwendig macht, den Ausdruck

$$\langle (\mathbf{G} \mathbf{u})^2 \rangle = G_x^2 \langle u_x^2 \rangle + 2G_x G_y \langle u_x u_y \rangle + G_y^2 \langle u_y^2 \rangle \quad (\text{D.4})$$

zu berechnen.

Um die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} \int d^2 r 2\mu u_{ik}^2(\mathbf{r}) + \lambda u_{jj}^2(\mathbf{r}) \quad (\text{D.5})$$

im Impulsraum darstellen zu können, führen wir einen Basiswechsel von einer Darstellung (u_x, u_y) in eine Darstellung (u_l, u_t) durch. Hierbei ist $\mathbf{u}_l(\mathbf{k})$ der longitudinale Anteil von \mathbf{u} bezüglich \mathbf{k} und $\mathbf{u}_t(\mathbf{k})$ der transversale Anteil

$$\mathbf{u}_l = \mathbf{e}_k(\mathbf{e}_k \mathbf{u}) \quad (\text{D.6})$$

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{u} - \mathbf{u}_l = \mathbf{u} - \mathbf{e}_k(\mathbf{e}_k \mathbf{u}). \quad (\text{D.7})$$

\mathbf{e}_k symbolisiert den Einheitsvektor in \mathbf{k} -Richtung. Die zugehörige Basiswechselmatrix ist

$$A = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{\sqrt{k^2}} & \frac{k_y}{\sqrt{k^2}} \\ -\frac{k_y}{\sqrt{k^2}} & \frac{k_x}{\sqrt{k^2}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.8})$$

und die zugehörige inverse Matrix

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{k_x}{\sqrt{k^2}} & -\frac{k_y}{\sqrt{k^2}} \\ \frac{k_y}{\sqrt{k^2}} & \frac{k_x}{\sqrt{k^2}} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.9})$$

Mit diesem Basiswechsel wird die fouriertransformierte Hamiltonfunktion zu (vgl. auch [27]):

$$H = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{2\pi} (2\mu + \lambda) k^2 u_l^2 + \mu k^2 u_t^2 \quad (\text{D.10})$$

Durch Ableiten findet man

$$\frac{\partial H}{\partial u_l(\mathbf{k})} = (\lambda + 2\mu) k^2 u_l(\mathbf{k}) \quad (\text{D.11})$$

$$\frac{\partial H}{\partial u_t(\mathbf{k})} = \mu k^2 u_t(\mathbf{k}). \quad (\text{D.12})$$

Benutzung des Äquipartitionsprinzips

$$\langle u_i \frac{\partial H}{\partial u_j} \rangle = T \delta_{ij} \quad (\text{D.13})$$

liefert

$$\langle u_l(\mathbf{k}) u_l(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{(\lambda + 2\mu) k^2} \langle u_l \frac{\partial H}{\partial u_l} \rangle = \frac{T}{(\lambda + 2\mu) k^2}, \quad (\text{D.14})$$

und

$$\langle u_t(\mathbf{k}) u_t(\mathbf{k}) \rangle = \frac{T}{\mu k^2}. \quad (\text{D.15})$$

Führt man jetzt die Rücktransformation mit Hilfe der inversen Matrix A^{-1} aus, so resultiert unter Beachtung von $\langle u_t(\mathbf{k})u_l(\mathbf{k}) \rangle = 0$ (wegen (D.13)):

$$\begin{aligned}\langle u_i(\mathbf{k})u_j(\mathbf{k}) \rangle &= \hat{k}_i \hat{k}_j \langle u_l u_l \rangle + (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) \langle u_t u_t \rangle \\ &= \frac{T}{(\lambda + 2\mu)k^2} \hat{k}_i \hat{k}_j + \frac{T}{\mu k^2} (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j).\end{aligned}\quad (\text{D.16})$$

Hierbei stehen die (i, j) für Kombinationen der (x, y) , ferner ist \hat{k}_i die i -te Komponente des Einheitsvektors $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$. Führt man nun eine Fouriertransformation durch, so erhält man wegen $\int_0^{2\pi} \hat{k}_i \hat{k}_j d\theta = \pi \delta_{ij}$ folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle u_i(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2 k \langle u_i(\mathbf{k})u_j(\mathbf{k}) \rangle \\ &= \delta_{ij} \frac{1}{4\pi} \int dk k \left(\frac{T}{(\lambda + 2\mu)k^2} + \frac{T}{\mu k^2} \right) \\ &= \delta_{ij} \frac{1}{4\pi} \ln R \left(\frac{T}{(\lambda + 2\mu)} + \frac{T}{\mu} \right) \\ &= T \ln R \frac{3\mu + \lambda}{4\pi\mu(\lambda + 2\mu)} \\ &= \langle (u_x(\mathbf{r}))^2 \rangle = \langle (u_y(\mathbf{r}))^2 \rangle.\end{aligned}\quad (\text{D.17})$$

Setzt man dieses Resultat in (D.4) ein, so findet man

$$\langle (\mathbf{G} \mathbf{u})^2 \rangle = G^2 T \ln R \frac{3\mu + \lambda}{4\pi\mu(\lambda + 2\mu)}.\quad (\text{D.18})$$

Mit (D.3) erhält man schließlich im Fall ohne Unordnung das bereits von Pokrovsky [16] gefundene Ergebnis

$$\langle \exp(i \mathbf{G} \mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle = R^{-\frac{T G^2 (3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)}}.\quad (\text{D.19})$$

D.2 Berechnung mit Unordnung

Unter Berücksichtigung der Unordnung nimmt die zu betrachtende Hamiltonfunktion die folgende Gestalt an

$$H = H_0 - \int d^2 r (\mu + \lambda) \Omega_0 \delta c(\mathbf{r}) u_{kk}(\mathbf{r}).\quad (\text{D.20})$$

Dabei steht H_0 für die Hamiltonfunktion des Systems ohne Unordnung (D.5). Ebenso bezeichnen $\langle \dots \rangle$ und $\langle \dots \rangle_0$ im folgenden die thermische Mittelung über den vollen Hamiltonian, beziehungsweise die Mittelung mit H_0 . Damit ist

$$[\langle \exp(i \mathbf{G} \mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D = \left[\frac{\langle e^{i \mathbf{G} \mathbf{u}(\mathbf{r})} e^{\frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \int d^2 r \delta c \nabla \mathbf{u}} \rangle_0}{\langle e^{\frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \int d^2 r \delta c \nabla \mathbf{u}} \rangle_0} \right]_D.\quad (\text{D.21})$$

Setzt man nun

$$x = i \mathbf{G} \mathbf{u} + \frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \int d^2 r \delta c \nabla \mathbf{u},\quad (\text{D.22})$$

so gilt

$$\langle e^x \rangle_0 = e^{\frac{1}{2} \langle x^2 \rangle_0}, \quad (\text{D.23})$$

da die Mittelung über H_0 wiederum eine gaußische Mittelung ist. Wir finden

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_0 = & - \langle (\mathbf{G} \mathbf{u})^2 \rangle_0 + 2i \frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \int d^2 r \delta c G_i \langle u_i(0) \nabla_j u_j(\mathbf{r}) \rangle_0 \\ & + \left(\frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \right)^2 \langle \int d^2 r \delta c \nabla \mathbf{u} \rangle_0^2. \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

Setzt man dies in (D.21) ein, so heben sich Nenner und der letzte Term des obigen Ausdrucks weg. Es bleibt:

$$\begin{aligned} [\langle \exp(i \mathbf{G} \mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D &= \left[e^{-\frac{1}{2} \langle (\mathbf{G} \mathbf{u})^2 \rangle_0} + e^{i \frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \int d^2 r \delta c G_i \nabla_j \langle u_i(0) u_j(\mathbf{r}) \rangle_0} \right]_D \\ &=: \left[e^{-\frac{1}{2} \langle (\mathbf{G} \mathbf{u})^2 \rangle_0} + e^{i I(0)} \right]_D \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

Die Unordnungsmittelung des ersten Terms ist unnötig, da er nicht von der Unordnung abhängt, er wurde in Abschnitt D.1 berechnet, das Resultat ist (D.19). Da die Unordnung gaußisch verteilt ist, gilt für die Unordnungsmittelung des zweiten Terms

$$\left[e^{i I(0)} \right]_D = e^{-\frac{1}{2} [I^2(0)]_D}, \quad (\text{D.26})$$

mit $[\delta c(\mathbf{r}) \delta c(\mathbf{r}')]_D = \sigma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Daraus folgt

$$[I^2(0)]_D = \left(\frac{(\mu + \lambda) \Omega_0}{T} \right)^2 \sigma G_r G_s \int d^2 r \nabla_i \langle u_r(0) u_i(\mathbf{r}) \rangle_0 \nabla_j \langle u_s(0) u_j(\mathbf{r}) \rangle_0. \quad (\text{D.27})$$

Mit Hilfe der in D.1 beschriebenen Methodik erhält man hier folgende Darstellung

$$\begin{aligned} [I^2(0)]_D &= \frac{(\mu + \lambda)^2 \Omega_0^2 \sigma}{(2\mu + \lambda)^2} G_r G_s \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{k_r k_s}{k^4} \\ &= \frac{(\mu + \lambda)^2 \Omega_0^2 \sigma}{4\pi(2\mu + \lambda)^2} (G_x^2 + G_y^2) \int dk k \frac{1}{k^2} \\ &= \ln R \frac{G^2 \sigma (\mu + \lambda)^2 \Omega_0^2 \sigma}{4\pi(2\mu + \lambda)^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

Setzt man dies in (D.25) ein, so ergibt sich die in Kapitel 5 benutzte Formel (5.15)

$$[\langle \exp(i \mathbf{G} \mathbf{u}(\mathbf{r})) \rangle]_D = R^{-\frac{T G^2 (3\mu + \lambda)}{8\pi\mu(\lambda + 2\mu)}} R^{-\frac{\sigma G^2 \Omega_0^2 (\mu + \lambda)^2}{8\pi(2\mu + \lambda)^2}}, \quad (\text{D.29})$$

die in ähnlicher Form bereits von Nelson [2] hergeleitet worden ist.

Literaturverzeichnis

- [1] C. C. Grimes und G. Adams, Phys. Rev. Lett. **42**, 795 (1979).
- [2] D. R. Nelson, Phys. Rev. B **27**, 2902 (1983).
- [3] T. Nattermann, S. Scheidl, S. E. Korshunov, M. S. Li, J. Phys. (France) I **5**, 565 (1995).
- [4] S. E. Korshunov und T. Nattermann, Phys. Rev. B **53**, 2746 (1996).
- [5] L. H. Tang, Phys. Rev. B **54**, 3350 (1996).
- [6] S. Scheidl, Phys. Rev. B **55**, 457 (1997).
- [7] M. C. Cha und H. A. Fertig, Phys. Rev. Lett. **74**, 4867 (1995).
- [8] C. A. Murray und D. H. Van Winkle, Phys. Rev. Lett. **58**, 1200 (1987);
C. A. Murray und R. A. Wenk, Phys. Rev. Lett **62**, 1643 (1989); C. A.
Murray, W. O. Sprenger, R. A. Wenk, Phys. Rev. B **42**, 688 (1990).
- [9] J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
- [10] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).
- [11] B. L. Halperin, in Proceedings of the Kyoto Summer School Institute on
Low Dimensional Systems (1979).
- [12] N. D. Mermin, Phys. Rev. **176**, 250 (1968).
- [13] A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
- [14] D. R. Nelson und B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
- [15] R. E. Kusner, J. A. Mann, J. Kerins, A. J. Dahm, Phys. Rev. Lett. **73**,
3113 (1994); R. E. Kusner, J. A. Mann und A. J. Dahm, Phys. Rev. B **51**,
5746 (1995).
- [16] I. Lyuksyutov, A.G. Naumovets und V. L. Pokrovsky, *Two-Dimensional
Crystals*, Academic Press (1992).
- [17] M. Rubinstein, B. Shraiman und D. R. Nelson, Phys. Rev. B **27**, 1800
(1983).
- [18] M. G. Forrester, S. P. Benz und C. J. Lobb, Phys. Rev. B **41**, 8749 (1990).

LITERATURVERZEICHNIS

- [19] A. Chakrabarti und C. Dasgupta, Phys. Rev. B **37**, 7557 (1988).
- [20] Y. Ozeki und H. Nishimori, J. Phys. A **26**, 3399 (1993).
- [21] J. Maucourt und D. R. Grempel, cond-mat/9703109 (1997).
- [22] J. Friedel, *Dislocations*, Pergamon (1964).
- [23] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Elastizitätstheorie*, Akademie-Verlag (1989).
- [24] D. R. Nelson, Phys. Rev. B **18**, 2318 (1978).
- [25] J. D. Eshelby, Solid State Phys. **3**, 79 (1956).
- [26] A. M. Kosevich, in *Dislocations in Solids Vol. 1*, Editor F. R. N. Nabarro, North-Holland (1979).
- [27] P. M. Chaikin und T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge (1995).
- [28] S. E. Korshunov und T. Nattermann, Physica B **222**, 280 (1996).
- [29] V. L. Pokrovsky und A. L. Talapov, *Theory of Incommensurate Crystals*, Soviet Scientific Reviews (1984).
- [30] M. Lehnen, *Das XY-Modell mit Phasenfrustration im Magnetfeld*, Dipl.-Arbeit in Köln (1997).
- [31] V. L. Pokrovsky und A. L. Talapov, Phys. Rev. Lett. **42**, 65 (1979).

This figure "bild104.gif" is available in "gif" format from:

<http://arXiv.org/ps/cond-mat/9710344v1>

This figure "bild501.gif" is available in "gif" format from:

<http://arXiv.org/ps/cond-mat/9710344v1>

This figure "bild502.gif" is available in "gif" format from:

<http://arXiv.org/ps/cond-mat/9710344v1>

This figure "bild506.gif" is available in "gif" format from:

<http://arXiv.org/ps/cond-mat/9710344v1>

This figure "bild507.gif" is available in "gif" format from:

<http://arXiv.org/ps/cond-mat/9710344v1>